

N° d'ordre : 3461

THÈSE DE DOCTORAT

Présentée par :

Nora MAAOUNI

Discipline : Physique

Spécialité : Physique des Matériaux

Titre :

Application de la Méthode de Monte Carlo à l'Etude des Propriétés Magnétiques de Nanostructures Etendues ou de Type Core-Shell

Soutenue le 22/05/2021, devant le jury :

Wahib OUSI BENOMAR	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Président
Abdelkader BOULEZHAR	PES, Faculté des Sciences, Université Hassan II- Ain Chock, Casablanca	Rapporteur/ Examineur
Hamid EZ-ZAHRAOUY	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Rapporteur/ Examineur
Omar EL BOUNAGUI	PH, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Rapporteur/ Examineur
Lahoucine BAHMAD	PES, Faculté des sciences, Université Mohammed V-Rabat	Examineur
Bousselhem KABOUCHI	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Co-Directeur de thèse
Abdelaziz MHIRECH	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Directeur de thèse

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSi) de la Faculté des Sciences, Université Mohammed V de Rabat, sous la direction du Professeur **Abdelaziz MHIRECH**, et la co-direction du Professeur **Bousselham KABOUCHI**.

Je remercie avant tout ALLAH le plus Puissant qui m'a offert la volonté et la santé et m'a aidé à réaliser et accomplir ce travail. Les recherches effectuées au cours n'auraient pu voir le jour sans la contribution et l'aide de plusieurs personnes auxquelles j'adresse mes profonds remerciements.

Je tiens à remercier vivement tous les membres du Jury pour l'honneur qu'ils m'ont accordé en acceptant de juger ce travail.

J'adresse mes authentiques et vifs remerciements à mon Directeur de thèse, Monsieur **Abdelaziz MHIRECH**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour ses qualités scientifiques et humaines, son soutien permanent et ses propositions scientifiques pertinentes, sa disponibilité et sa patience. Je le remercie de tout mon cœur pour l'aide qu'il a apportée pour l'avancement et la réalisation de cette thèse.

Mes remerciements sincères vont également à mon Co-Directeur de thèse, Monsieur **Bousselham KABOUCHI**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour sa disponibilité et le temps qu'il m'a consacré. Il a toujours eu le temps de répondre à mes questions et il a patiemment fourni la bonne vision, les encouragements et les conseils précieux qui ont éclairci mon chemin et m'ont mis sur la bonne voie.

Je remercie Monsieur **Wahib OUSI BENOMAR**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat d'avoir accepté de présider le Jury de cette thèse. C'est un honneur pour moi.

Mes vifs et profonds remerciements vont à Monsieur **Lahoucine BAHMAD**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour sa participation à mon jury de thèse en qualité d'examineur pour ses remarques judicieuses et ses orientations qu'il n'a pas cessé de me

prodiguer dans le but de l'amélioration et la valorisation de ce travail. Veuillez agréer, Monsieur, l'assurance de mon profond respect.

Un grand merci à Monsieur **Hamid EZ-ZAHRAOUY**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat et Directeur du Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCS*CI*) pour sa serviabilité et son aide pour mettre en place ce travail, et d'avoir accepté d'être rapporteur de ma thèse.

Je tiens à remercier, également, Monsieur **Abdelkader BOULEZHAR**, Professeur à la Faculté des Sciences Aïn Chock de Casablanca, Université Hassan II, qui a bien voulu mobiliser son temps et ses compétences en qualité de rapporteur de ce travail de thèse. Il m'a fait l'honneur de juger ce travail.

Je remercie Monsieur **Omar EL BOUNAGUI**, Professeur Habilité à la Faculté des sciences de Rabat, pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail de recherche et pour avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse.

J'ai une pensée particulière pour des personnes qui me sont très chères, mais qui ne peuvent malheureusement pas être aujourd'hui avec moi, **mes deux bons papas**, que leurs âmes reposent en paix.

Un gracieux merci à la femme fatale qui s'est battu et a sacrifié sa vie entière pour moi et à **ma sœur Hind** après le décès de mon papa depuis quand nous étions petites. Mille merci à **ma sœur** et à **ma mère**, à qui je dédie cette thèse, de m'avoir toujours encouragées et soutenues durant la préparation de ce travail. Sans toi **maman**, je ne suis rien.

Je voudrais également remercier tous les membres du laboratoire LaMCS*CI* et aussi mes collègues **Mohamed QAJJOUR** et **Zakaria FADIL** et tout le corps professoral qui a participé à ma formation, et sans oublier ma chère amie **SOUKY** pour son aide et son effort pour améliorer ma langue anglaise.

RESUME

Dans ce mémoire, nous nous sommes intéressés essentiellement à l'étude des propriétés magnétiques et thermiques de nanostructures, à savoir : structure ferrimagnétique étendue composée de deux arrangements d'atomes ABA et BAB, Borophene core-shell, alliage binaire de Borophene, nanotubes core-shell et nanotubes avec interaction R_{KKY} (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida). Nous avons réussi grâce aux simulations de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis d'étudier les propriétés magnétiques de ces nanostructures. Nous avons adopté le modèle de Blume-Capel pour explorer l'existence de certains phénomènes physiques tels que : la température de compensation, les transitions de phases magnétiques, la température critique, ainsi que les comportements de l'aimantation, de la susceptibilité magnétiques et des cycles d'hystérésis. En effet, nous avons établi les diagrammes de phases de l'état fondamental des nanostructures considérées dans différents plans. Nous avons également étudié l'effet des paramètres des interactions de couplage et celui de la dilution sur les propriétés magnétiques de ces nanostructures. Les résultats obtenus montrent des phénomènes importants qui pourraient intéresser la communauté scientifique qui s'intéresse aux nanotechnologies.

Mots clés : Nanomatériaux; Simulations de Monte Carlo; Borophene; Nanotubes ; Structure Core-Shell; Diagrammes de phases; Température de compensation; Dilution; Cycles d'hystérésis.

ABSTRACT

This work is of scientific interest and of a great importance in industry. In this thesis, we are mainly interested in the study of the magnetic and thermal properties of nano-systems, namely: ferrimagnetic structure composed of two atom arrangements ABA and BAB, Borophene core-shell, Borophene in binary alloy, core-shell nanotubes and nanotubes with R_{KKY} interaction (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida). We have succeeded, due to Monte Carlo Simulation under the Metropolis algorithm, to study the magnetic properties of these nanostructures. However, we have adapted the Blume-Capel model to explore the existence of certain physical phenomena such as: compensation temperature, magnetic phase transitions, critical temperature, as well as the behaviors of magnetizations and magnetic susceptibilities, and cycles hysteresis. Moreover, we have determined the ground states phase diagrams. In addition, we have discussed the effects of exchange coefficient and dilution interactions on the magnetic properties of the studied nanostructures. In fact, the studied nano-materials in this thesis could have eminent potential for technological applications in several scientific fields and in industry.

Keywords: Nano-materials; Monte Carlo simulations; Borophene; Nanotubes; Phase diagrams; Compensation temperature; Transition temperature; Blume-Capel model; Hysteresis cycles; Magnetic field ; Core-Shell structure.

SOMMAIRE

Introduction générale	1
Chapitre I : Propriétés magnétiques des matériaux, Formalisme, modèles et méthode de calcul	3
I.1 Introduction	4
I.2. Origine du magnétisme	5
I.3. Différentes formes des matériaux magnétiques	7
I.3.1. Diamagnétisme	8
I.3.2. Paramagnétisme	8
I.3.3. Super-paramagnétisme	10
I.3.4. Ferromagnétisme.....	10
I.3.5. Antiferromagnétisme.....	11
I.3.6. Ferrimagnétisme.....	12
I.3.7. Anti-ferrimagnétisme	13
I.4. Différents types de température de transition	13
I.4.1. Température de Curie.....	14
I.4.2. Température de Néel	14
I.4.3. Température de compensation	14
I.4.4. Température de blocage	15
I.5. Anisotropie Magnétique	15
I.6. Cycle d'hystérésis	16
I.7. Interactions magnétiques	17
I.7.1. Super-échange.....	17
I.7.2. Double échange.....	19
I.7.3. Couplage Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY).....	19
I.8 Modèles de spin	21
I.8.1 Modèle d'Ising	21
I.8.2 Modèles XY	23
I.8.3 Modèle d'Heisenberg	23
I.8.4. Modèles de Blume-Capel et Blume-Emery-Griffiths (BEG)	24
I.8.5. Modèle de Potts	25
I.9 Simulations Monte Carlo	26
I.9.1 Équation Maître et Estimateur	26

I.9.2 Principes de la simulation Monte Carlo	28
I.9.3 Temps d'équilibre	32
I.9.4. Mesures	33
I.10 Algorithmes de simulation Monte Carlo	33
I.10.1 Algorithme de Metropolis.....	33
□ Configuration initiale	35
□ Sélection des degrés de liberté	35
□ Conditions aux limites	35
□ Effets de taille finie.....	35
□ Erreurs statistiques.....	35
I.13 Conclusion	36
Chapitre II : Comportement de la température de compensation dans les structures ferrimagnétiques types ABA et BAB étendues diluées	37
II.1 Introduction	38
II.2 Hamiltonien du système	39
II.3 Simulation Monte Carlo	40
II.4 Résultats et discussion	42
II.4.1 Etude des diagrammes phase à l'état fondamental	42
II.4.2 Résultats Monte Carlo.....	43
II.4.2.1. Comportement de l'aimantation pour les deux structures ABA et BAB.....	43
II.4.2.2. Effet du coefficient de couplage R_{AB} sur les aimantations et la température de compensation pour les deux structures ABA et BAB	46
II.4.2.3. Effet du couplage R_{BB} sur les aimantations et la température de compensation pour les deux structures ABA et BAB.....	48
II.4.2.4 Effet de la dilution des atomes du plan B sur les aimantations et la température de compensation des deux structures étudiées : ABA et BAB.....	51
II.5. Conclusion.....	54
Chapitre III: Propriétés magnétiques et thermiques d'une structure de Borophène core-shell: étude par la méthode de Monte Carlo.....	55
III. Introduction	56
III.2 Modèle et théorie.....	57
III.3. Résultats et Discussions.....	59
III.3.1 Etude des diagrammes phase de l'état fondamental.....	59
III.3.2 Résultats des simulations par la méthode Monte Carlo.....	63
III.3.2.1 Comportement thermique de l'aimantation et de la susceptibilité.....	65

III.3.2.2 Effet des couplages R_1 et R_2 sur les aimantations et sur la température de compensation.	66
III.3.2.3. Effets du champ cristallin et des couplages R_1 et R_2 sur l'aimantation totale du système.	69
III.3.2.4 Détermination des cycles d'hystérésis	71
III.5. Conclusion	74
Chapitre IV: Comportements des propriétés thermiques et magnétiques d'une structure en alliage binaire de borophène: étude de Monte Carlo	75
IV.1 Introduction	76
IV.2 Théorie et description du modèle	77
IV.3 Résultats et discussions des simulations Monte Carlo	79
IV.3.2 Variation du champ cristallin	88
VI.3.3 Détermination des Cycles d'Hystérésis	89
IV.4 Conclusion	91
Chapitre V: Propriétés thermiques et magnétiques d'une structure nanotube Core-Shell anti-ferrimagnétique: Etude Monte Carlo	92
V.1 Introduction	93
V.2 Hamiltonien et description du système	94
V.3 Etude des diagrammes phase de l'état fondamental	95
V.4 Résultats de la simulation Monte Carlo	99
V.4.1 Effet du couplage des spins S dans la coquille J_S	101
V.4.2 Effet du couplage J_{CS} des spins entre le noyau et la coquille	103
V.4.3 Effet du couplage J_C des spins du noyau	105
V.4.4 : Effet du champ cristallin et des couplages sur les comportements de l'aimantation du système	106
V.4.3 Comportement de la température de blocage	109
V.5. Conclusion	110
Chapitre VI : Comportement de la température de compensation dans une structure Core-Shell de nanotubes avec interactions RKKY: simulation de Monte Carlo	111
VI.1 Introduction	112
VII.2 Théorie et modèle	112
VI.3 Etude des diagrammes de phase de l'état fondamental ($T=0$).	114
VI.4 Résultats de la simulation Monte Carlo	118
VI.4.1 Les variations thermiques des aimantations et des susceptibilités sous l'effet des couplages.	118

VI.4.2 Cycles d'hystérésis magnétiques	124
VI.5 Conclusion	127
Conclusion générale et perspectives.....	128
Références	131
Production scientifique.....	1466

INTRODUCTION GENERALE

Le magnétisme dans les systèmes à matière condensée, y compris les verres de spin et les systèmes de faible dimensions ou nanostructures, a un grand intérêt aujourd'hui [1,2]. De plus, le magnétisme existe en deux formes variées : le magnétisme intrinsèque qui concerne les propriétés magnétiques relatives à la structure électronique des atomes constituant le matériau et d'autres principes fondamentaux dans les solides. Par ailleurs, le magnétisme extrinsèque est relatif aux propriétés des domaines magnétiques et des phénomènes connexes [3].

Il est tout de même intéressant de signaler que les systèmes macroscopiques présentent des propriétés magnétiques qui sont fondamentalement différentes de celles des atomes qui les constituent. Cela se produit parce que le magnétisme est un phénomène collectif, impliquant la coopération mutuelle d'un grand nombre de particules et est en ce sens similaire à la supraconductivité, à la superfluidité et même au phénomène de l'état solide lui-même. D'ailleurs l'étude des propriétés magnétiques des matériaux s'avère d'une difficulté extrême. Cette complexité est due en grande partie aux nombreux types de comportements magnétiques. En effet, un grand nombre de comportements magnétiques différents ont été observés dans les solides, comme par exemple, l'antiferromagnétisme, le ferromagnétisme, l'anti-ferrimagnétisme, le ferrimagnétisme et le verre de spin. Cette diversité des comportements magnétiques résulte principalement de la multitude des diverses interactions spin-spin observées dans les matériaux [4,7]. En effet, afin de répondre aux besoins pour une variété de demandes, de nouveaux matériaux doivent être développés. Certes, non seulement la détermination structurelle, mais aussi les propriétés magnétiques et électroniques de ces nouveaux matériaux doivent être examinées. Ceci peut être réalisé avec l'utilisation des méthodes de calcul et de simulation puissantes. L'intérêt de répondre à des questions fondamentales va parallèlement avec la volonté technologique de trouver de nouveaux matériaux utilisables comme aimants permanents, capteurs ou dans des applications d'enregistrement. Ces matériaux sont aussi utilisés pour les moteurs électriques, les ordinateurs, les postes de radio et de télévision, les téléphones et les équipements audio ou vidéo, etc... Ce sont également des composants indispensables dans une large gamme d'équipements industriels et médicaux [8,10].

En effet, l'utilisation des méthodes de calcul et de modélisation qui tiennent en considération la structure électronique des éléments chimiques est nécessaire dans l'étude des propriétés

magnétiques des matériaux. Parmi ces méthodes on trouve la méthode Monte Carlo. Cette méthode est parmi les méthodes mathématiques les plus importantes et techniquement sophistiquées dans la simulation numérique des phénomènes physiques. Elle est appuyée sur la théorie des probabilités et l'utilisation de l'échantillonnage aléatoire [11-14].

Dans ce mémoire, nous étudions les propriétés magnétiques de certaines nanostructures étendues ou de type core-shell. Pour chaque nanostructure, nous commençons par déterminer les diagrammes de phases à l'état fondamental ($T = 0$ K). Ensuite, pour des températures non nulles, nous utilisons les simulations de Monte Carlo afin d'étudier les propriétés magnétiques (aimantation, susceptibilité, cycle d'hystérésis) des nanostructures considérées.

Le manuscrit de cette thèse est structuré de la façon suivante:

Dans le chapitre I, nous présentons une revue bibliographique sur les propriétés magnétiques des matériaux. Puis, nous rappelons les concepts de base de la méthode de Monte Carlo et les algorithmes associés.

Dans le chapitre II, nous exposons les résultats des calculs des propriétés magnétiques pour une structure ferrimagnétique diluée d'arrangement d'atomes de type ABA et BAB.

Les chapitres III et IV concernent l'étude des propriétés magnétiques et thermiques de la structure Borophene core-shell et Borophene en alliage binaire où les aimantations partielles et totales en fonction de la température, du champ cristallin et des paramètres de couplage d'échange sont étudiées et discutées pour les deux nanostructures. Les comportements thermiques de la susceptibilité et du cycle d'hystérésis correspondant à ces nanostructures sont également traités.

Les chapitres V et VI sont consacrés à l'étude des propriétés magnétiques de nanotubes core-shell et de nanotubes avec l'interaction R_{KKY} (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida).

Nous terminons cette thèse par une conclusion générale.

CHAPITRE I:

**PROPRIETES MAGNETIQUES DES MATERIAUX,
FORMALISME, MODELES ET METHODES DE CALCUL**

I.1 Introduction

Dans certains matériaux, les propriétés magnétiques sont provoquées par le moment des atomes. En effet, les atomes qui forment la matière sont composés de noyaux autour desquels les électrons gravitent. Le mouvement électronique supplémentaire, provoqué par l'application d'un champ magnétique externe, crée les moments magnétiques. Il est vrai que tous les matériaux sont plus ou moins influencés par la présence d'un champ magnétique externe [15], néanmoins, leur réaction diffère d'un matériau à l'autre. Ainsi, l'état magnétique d'un matériau dépend non seulement du champ magnétique mais aussi de plusieurs autres paramètres tels que la température, la pression et des interactions entre atomes. De plus, l'ordre magnétique des matériaux résulte de l'existence d'interactions magnétiques entre les atomes du système.

Dans la première section de ce chapitre, nous allons brièvement présenter l'origine du magnétisme et puis nous citerons les différents types de matériaux classifiés selon leur comportement magnétique. Nous allons aussi décrire différents types de température de transition ainsi que la classification de magnétisation de Néel. Nous donnerons une présentation détaillée des propriétés hystérétiques. La deuxième section fournira des détails sur la spintronique et les matériaux utilisés dans ce domaine. Finalement la dernière partie sera dédiée aux différents types des interactions magnétiques.

D'autre part, dans ce chapitre, nous présenterons les notions de base pour comprendre le principe des simulations par la méthode de Monte Carlo. De plus, nous introduirons les algorithmes d'échantillonnage les plus utilisés.

Les méthodes de Monte Carlo sont principalement utilisées pour résoudre des problèmes d'intégration numérique ou d'optimisation là où les autres méthodes nécessitent des ressources de calculs prohibitifs. Dans les statistiques de nos jours, avec la montée des techniques et puissance de calcul, les méthodes de Monte Carlo sont devenues largement utilisées. Ces procédures statistiques nécessitent de générer des échantillons aléatoires à partir d'une distribution de probabilité donnée, souvent non trivial, en particulier pour les problèmes de grande dimension. L'importance la méthode de Monte Carlo réside dans les grands progrès réalisés dans plusieurs domaines au cours des deux décennies. En d'autres termes, les progrès réalisés sont attribués à la méthode de Monte Carlo qui sert d'outil largement utilisé pour résoudre des problèmes dans un certain nombre de domaines tels que les statistiques

appliquées, ingénierie, finance et business, design et visuels, informatique, télécommunications sans oublier les sciences physiques.

I.2. Origine du magnétisme

L'explication et la détermination de l'évolution de la structure magnétique d'un matériau nécessite de revenir à l'échelle atomique puis au cristal. Pour comprendre l'origine du magnétisme atomique, il faut étudier le moment magnétique atomique provenant des électrons non appariés occupant les orbitales localisées dans des couches incomplètes. Ce moment magnétique est déterminé par le moment orbital. Plus explicitement, dans un atome, chaque électron unique est caractérisé par un moment orbital (μ_{orb}) associé à son mouvement orbital et un moment intrinsèque ou de spin (μ_s). Par conséquent, il existe deux sources de moment magnétique atomique. Le premier est le mouvement des électrons dans une orbite autour du noyau et l'autre est le mouvement du spin des électrons autour d'eux-mêmes (voir figure I.1).

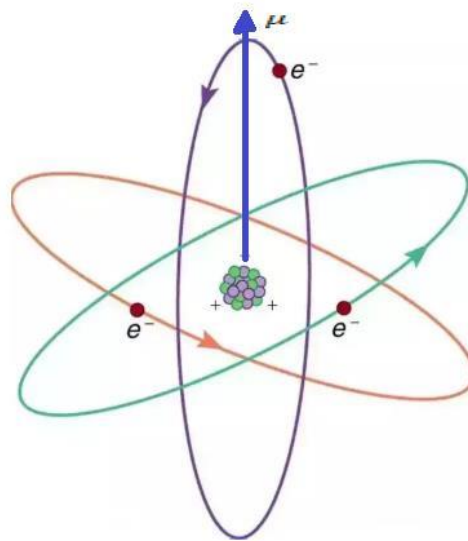


Figure.I.1. Trajectoire de l'électron autour du noyau [16]

La combinaison de ces deux types de mouvements produira un moment magnétique atomique qui dépend fortement de la matière. Dans certaines matières magnétiques, les moments magnétiques de la plupart des électrons disposés ensemble, génère un champ magnétique uniforme. En fait, le moment magnétique de spin est le comportement intrinsèque d'un électron qui est associé au moment angulaire de spin (S) par l'équation suivante (I.1) [17]:

$$\mu_s = S \frac{e}{m} \quad (\text{I.1})$$

où m et e font référence à la masse et la charge de l'électron, respectivement. Le moment S est quantifié et ne peut être que $\pm 1/2$. Puisque la seule composante z de S est mesurable, par conséquent, la composante z de μ_s peut être estimée à partir de l'équation (I.2) [17]:

$$\mu_{s,z} = \pm \frac{eh}{4\pi m} \quad (\text{I.2})$$

où h est la constante de Planck. La valeur positive de cette équation est égale à $9.27 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$ et est connu comme le magnéton de Bohr (μ_B). μ_B est l'unité de base du moment magnétique dans le magnétisme. En effet, les matériaux magnétiques sont expliqués en fonction de cette quantité. Pour chaque électron d'un atome, le moment magnétique de spin est $\pm \mu_B$. La combinaison du moment magnétique de spin et du moment magnétique orbital influence le type de magnétisme présent pour chaque élément. L'aimantation est un comportement qui explique à quel point un matériau magnétique est influencé par un champ magnétique. Les matériaux sont, par conséquent, classés en fonction de leur réponse à un champ appliqué de manière externe. La description des moments magnétiques dans les matériaux couvre différentes formes de magnétisme existant dans la nature. Ainsi, lorsque les électrons sont appariés, leur sens opposé des spins entraîne l'annulation de leurs moments magnétiques les uns par rapport aux autres. Inversement, un moment magnétique existera dans les matériaux contenant des électrons non appariés et réagira à un champ appliqué de manière externe.

Généralement en physique de la matière condensée, le magnétisme provient de l'alignement parallèle des moments de spin couplés par l'interaction d'échange qui est d'origine électrostatique et de très courte portée. L'ordre magnétique se déduit à partir du signe de l'énergie d'échange E_{ex} :

□ Un ordre ferromagnétique pour $E_{\text{ex}} > 0$ (les moments $\vec{\mu}_s$ sont parallèles entre eux).

- Un ordre antiferromagnétique pour $E_{ex} < 0$ (les moments $\vec{\mu}_s$ sont antiparallèles et se compensent exactement)

- Un ordre ferrimagnétique pour $E_{ex} > 0$ (existence de deux types de moments différents couplés parallèlement et appartenant à deux sous-réseaux distincts; un moment magnétique résultant subsiste).

- Un ordre anti-ferrimagnétique pour $E_{ex} < 0$ (existence de deux types de moments différents couplés antiparallèlement et appartenant à deux sous-réseaux distincts).

I.3. Différentes formes des matériaux magnétiques

Les propriétés magnétiques des matériaux apparaissent à partir de leurs moments magnétiques atomiques produits par le spin et le moment orbital de leurs électrons. Par conséquent, les matériaux sont classés en fonction de leur comportement dans un champ magnétique externe. En effet, certains matériaux sont beaucoup plus magnétiques que d'autres [18] et ce fait peut s'expliquer par la nature des interactions entre les moments magnétiques atomiques qui sont établis dans la structure. Selon leur comportement magnétique, les matériaux sont classés en deux catégories:

- ❖ Matériaux magnétiques non ordonnés (magnétisme non coopératif) tels que Diamagnétique, Paramagnétique et super-paramagnétique [16,19].
- ❖ Matériaux magnétiques ordonnés avec des électrons non appariés (magnétisme coopératif) tels que matériaux ferromagnétiques, antiferromagnétiques, ferrimagnétiques et anti-ferrimagnétiques [16,19].

En outre, le développement incessant de la science conduit à l'émergence de nouveaux groupes de matériaux. Dont le comportement magnétique ne correspond à aucun de ces deux classifications telles que les matériaux Meta-magnétique, Héli-magnétiques, Spéro-magnétiques et les verres de spin. C'est aussi important de noter que le comportement magnétique des matériaux peut varier en fonction des changements associé à d'autres facteurs tels que la température.

I.3.1. Diamagnétisme

Le diamagnétisme est une forme très faible de magnétisme non permanent et qui persiste uniquement lorsqu'un champ externe est appliqué. Elle est induite par un changement de mouvement orbital d'électrons dû à un champ magnétique appliqué.

En réalité, L'application d'un champ externe modifie la vitesse orbitale des électrons autour de leurs noyaux et conduit à la variation du moment dipolaire magnétique dans une direction opposée au champ appliqué. La propriété de diamagnétisme étant très faible, toute autre forme de comportement magnétique qu'un matériau peut impliquer l'emporte généralement sur cet effet. Basé sur la configuration électronique des matériaux, cet état de magnétisme a lieu dans ces matériaux avec des couches électroniques remplies dans lesquelles le magnétisme des moments sont appariés et s'annulent mutuellement. Les substances diamagnétiques sont formées par les atomes qui sont caractérisés par la sensibilité négative ($\chi = -10^{-5}$) [20-21].

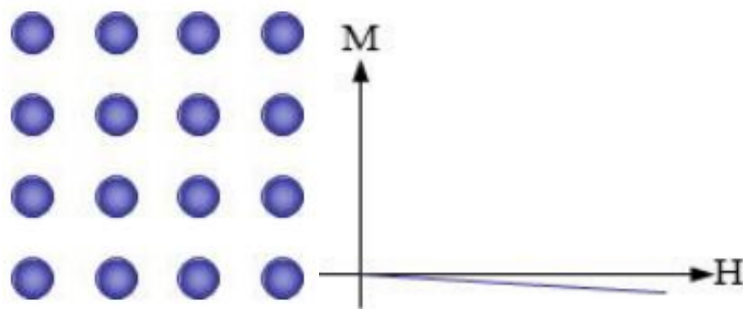


Figure I.2 : (a) Réseau des atomes dans un matériau diamagnétique. (b) Variation de l'aimantation en fonction du champ appliqué.

I.3.2. Paramagnétisme

Dans cette classe de matériaux, certains atomes ont un moment dû à des orbitales électroniques incomplètes. Mais, il n'y a pas d'interaction entre ces atomes aimants. Le comportement de ces matériaux est caractérisé par un moment magnétique qui suit la direction du champ appliqué. La magnétisation est aussitôt nulle lorsque le champ appliqué est supprimé. Il existe plusieurs théories du paramagnétisme qui sont valables pour des types spécifiques de matériaux. Le modèle de Langevin, qui est vrai pour les matériaux à localisation non interactive électrons, indique que chaque atome a un moment magnétique qui est orienté au hasard comme un résultat de l'agitation thermique. L'application d'un champ

magnétique crée un léger alignement de ces moments et donc une faible aimantation dans la même direction que l'application champ. La raison de l'apparition d'un léger alignement est décrite par la corrélation inverse de la susceptibilité (χ) avec la température (T). Ce comportement est connu sous le nom de loi de Curie et est illustré ci-dessous par l'équation (I.3), où C est une constante matérielle appelée constante de Curie [19,21].

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (\text{I.3})$$

Au fur et à mesure qu'un champ appliqué est plus élevé, la température et l'agitation thermique augmentent. L'alignement des moments magnétiques devient plus difficile et donc la susceptibilité diminue. Par conséquent, La loi de Curie décrit également la susceptibilité positive donnée par l'équation suivante :

$$\chi = \frac{C\mu_0NM^2}{KT} \quad (\text{I.4})$$

Où C, N, μ , T et K désignent, respectivement, une constante positive, le nombre de dipôles magnétiques par unité de volume, la perméabilité du vide, la température absolue et la constante de Boltzmann [22]. Sauf pour les très basses températures, habituellement moins de 5K, les propriétés de certains matériaux paramagnétiques découlent de cette équation. Cependant, la majorité des matériaux paramagnétiques obéissent à la loi de Curie – Weiss :

$$\chi = \frac{C}{T - T_C} \quad (\text{I.5})$$

où T_C la température critique.

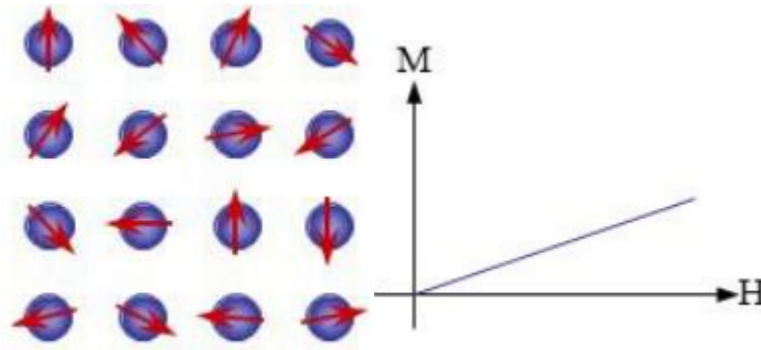


Figure I.3 : (a) Réseau des atomes dans un matériau paramagnétique. (b) Variation de l'aimantation en fonction du champ appliqué

I.3.3. Super-paramagnétisme

Le super-paramagnétisme est un type de magnétisme qui peut apparaître dans les matériaux nano-ferromagnétiques ou particules nano-ferrimagnétiques et se compose de domaines magnétiques uniques. De plus, les matériaux super-paramagnétiques présentent un comportement paramagnétique en dessous de leur température critique où les agitations thermiques ne sont pas assez fortes. Les forces d'interaction entre les atomes individuels dominent les agitations thermiques. Mais, les agitations thermiques réussissent à changer la direction de l'aimantation de la particule entière. En conséquence, les directions des moments magnétiques des particules dans les cristaux sont disposées au hasard. Ainsi, le moment magnétique net est nul [23-24].

I.3.4. Ferromagnétisme

Le ferromagnétisme est possible lorsque les atomes sont disposés en réseau et que les moments peuvent interagir pour s'aligner parallèlement les uns aux autres. Cet effet est expliqué dans la théorie classique par la présence d'un champ moléculaire dans le matériau ferromagnétique qui a été postulé par Weiss en 1907 [25]. Ce champ est suffisant pour magnétiser le matériau à saturation. En mécanique quantique, le modèle de ferromagnétisme de Heisenberg décrit l'alignement parallèle de moments en termes d'interaction d'échange entre moments voisins. Weiss a postulé la présence de domaines magnétiques dans le matériau qui sont des régions où les moments magnétiques atomiques sont alignés. Le mouvement de ces domaines détermine comment le matériau réagit à un champ magnétique et, par suite, la susceptibilité dépend du champ magnétique appliqué.

Les matériaux ferromagnétiques sont généralement comparés en termes de l'aimantation à saturation (aimantation lorsque tous les domaines sont alignés) déduites dans l'application des champs magnétiques élevés.

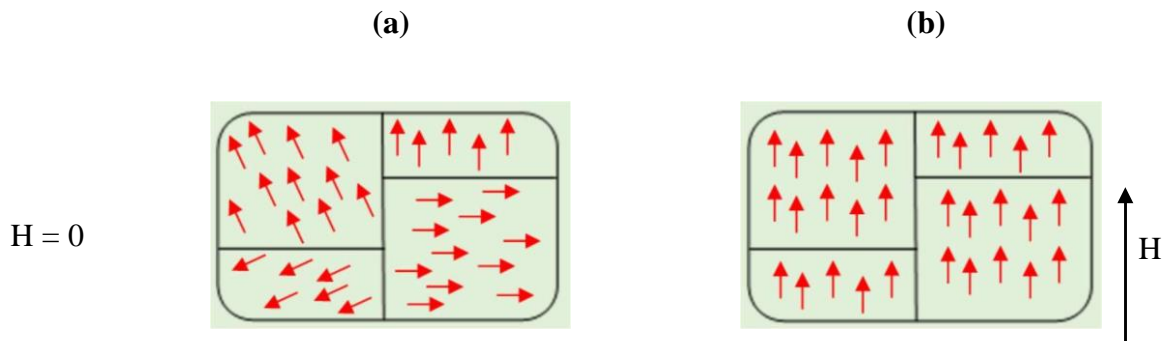


Figure I.4 : Domaines magnétiques dans un matériau ferromagnétique : (a) en absence de champ magnétique externe (b) en présence de champ magnétique externe.

L'alignement, parallèle des moments nets dans les matériaux ferromagnétiques, provoque une magnétisation nette même s'il n'existe pas de champ externe appliqué. Par conséquent, ces matériaux ont deux traits principaux : (1) la magnétisation spontanée qui est la magnétisation nette et qui peut être présentée à l'intérieur d'un même volume aimanté, puis (2) la présence d'une température de commande magnétique. La susceptibilité du matériau ferromagnétique est souvent grande et de valeur positive. Cela dépend de la microstructure du matériau étudié. L'élévation de la température augmente les vibrations du réseau qui entraînent une perturbation de l'alignement des spins. Le comportement ferromagnétique disparaît à une température critique, appelée température de Curie (T_C). Au-delà de cette température, le cristal se comporte comme paramagnétique.

I.3.5. Antiferromagnétisme

Les matériaux antiferromagnétiques sont similaires aux matériaux ferromagnétiques, mais l'interaction d'échange entre les atomes voisins conduit à l'alignement antiparallèle des moments magnétiques atomiques. Par conséquent, le champ magnétique s'annule et le matériau semble se comporter de la même manière qu'un matériau paramagnétique. Comme les matériaux ferromagnétiques, ces matériaux deviennent paramagnétiques au-dessus d'une température de transition, connue sous le nom de température de Néel, T_N .

Cette température est la clé de l'explication des propriétés antiferromagnétiques. Au-dessus de cette température T_N , une énergie thermique suffisante provoque l'annulation des moments magnétiques atomiques égaux et alignés de manière opposée. Par conséquent, l'alignement à fluctuation aléatoire entraîne la disparition de leur ordre à long terme. En fait, au-dessus de T_N , un comportement paramagnétique est favorable et le paramètre de loi de Curie–Weiss présente une interception négative impliquant des interactions d'échange négatives. En dessous de T_N , une aimantation spontanée se produit dans les matériaux antiferromagnétiques, résultant d'un alignement antiparallèle des moments dipolaires magnétiques des sous-réseaux [26-27].

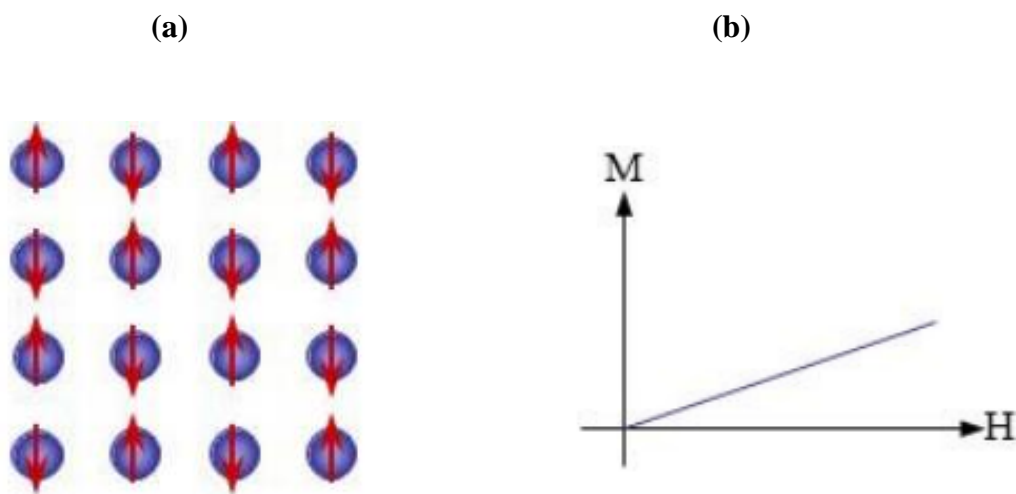


Figure.I.5 : (a) Réseau des atomes dans un matériau antiferromagnétique. (b) Variation de l'aimantation en fonction du champ appliqué.

I.3.6. Ferrimagnétisme

Le ferrimagnétisme n'est observé que dans les composés qui ont des structures cristallines plus complexes que des éléments purs. Au sein de ces matériaux, les interactions d'échange conduisent à un alignement parallèle d'atomes dans certains sites cristallins et alignement antiparallèle dans d'autres. Le matériau se décompose en domaines magnétiques, tout comme un matériau ferromagnétique, et le comportement magnétique est également similaire, bien que les matériaux ferrimagnétiques aient généralement des aimantations à saturation plus faible. La structure ferrimagnétique est considérablement formée de deux sous-réseaux A et B. Ces sous-réseaux ont des moments atomiques inégaux et une aimantation spontanée nette.

Les interactions les plus fortes entraînent un alignement antiparallèle des spins entre les sous-réseaux A et B. En outre, les matériaux ferrimagnétiques conservent une aimantation spontanée au-dessous de T_N et ne présentent aucun ordre magnétique (comportement des matériaux paramagnétiques) au-dessus de T_N [28]. Normalement, dans un domaine magnétique, un moment magnétique net est induit par la disposition antiparallèle de sous-réseaux non équivalents adjacents. Par conséquent, le comportement macroscopique du ferrimagnétisme est effectivement un comportement du ferromagnétisme. Dans les matériaux ferrimagnétiques, les moments dipolaires magnétiques se divisent en sous-réseaux et sont organisés en un sous-ensemble de matériaux antiferromagnétiques. Chaque sous-réseau peut être conduit comme un comportement de matériaux ferromagnétiques et l'existence d'une discordance entre les moments dipolaires magnétiques conduit à une magnétisation nette du matériau ferrimagnétique [15-16].

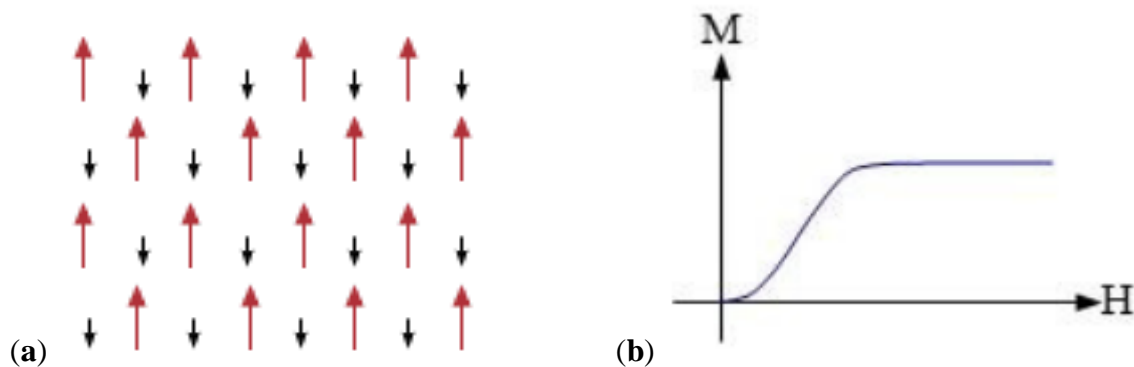


Figure.I.6 : (a) Alignement des moments de spin dans les matériaux ferrimagnétiques. (b) Variation de l'aimantation en fonction du champ appliqué.

I.3.7. Anti-ferrimagnétisme

I.4. Différents types de température de transition

L'ordre magnétique des matériaux est fortement influencé par le changement de température. Ainsi, un matériau a Les matériaux anti-ferrimagnétiques ont une apparence similaire à l'antiferromagnétique matériaux. En fait, les spins des matériaux anti-ferrimagnétiques sont divisés en deux (ou plus) sous-réseaux magnétiques inégaux au sein desquels les interactions

sont antiferromagnétiques. Les spins sont donc antiparallèles les uns aux autres. C'est particulièrement le cas dans les composés qui contiennent deux types d'atomes de moments magnétiques de spins différents.

des comportements magnétiques différents en fonction de sa température.

Les différents ordres de température sont : la température de Curie, la température de Néel, la température de compensation ainsi que la température de blocage.

I.4.1. Température de Curie

La température de Curie (T_c) montre que le magnétisme a été perdu à une température critique. Ainsi, nommé le point de Curie qui est le point critique auquel les moments magnétiques intrinsèques d'un matériau changent de direction. La température de Curie est la température qui sépare la phase ordonnée de celle désordonnée [29,32].

I.4.2. Température de Néel

Les matériaux antiferromagnétiques deviennent paramagnétiques au-dessus d'une température de transition connue comme température de Néel, T_N . Elle est similaire à la température de Curie en ce qui concerne matériaux ferromagnétiques. L'énergie thermique est suffisante pour rompre l'ordre magnétique microscopique de la matière lorsque la température du système est au-dessus de T_N . D'autre part, le matériau peut récupérer ses propriétés antiferromagnétiques lorsque la température est inférieure à la température de Néel [26-17], [32], [37].

I.4.3. Température de compensation

Certains matériaux ferrimagnétiques peuvent avoir, sous certaines conditions, une température de compensation, T_{comp} . La température de compensation est la température à laquelle l'aimantation totale du système disparaît en dessous de la température critique. Ceci est dû à la nature de l'interaction d'échange entre les deux moments inégaux des sous-réseaux qui forment le matériau ferrimagnétique. A la température de compensation, le champ magnétique les moments des deux sous-réseaux sont antiparallèles et ont la même valeur absolue du moment magnétique [33-34]. Par conséquent, au point de compensation, nous avons :

$$\left| M_A (T_{comp}) \right| = \left| M_B (T_{comp}) \right| \quad (\text{I.6})$$

I.4.4. Température de blocage

À l'échelle nanométrique, la température et le temps ont un effet crucial sur les moments magnétiques des nanoparticules. De nombreuses notions très importantes en découlent, comme le super-paramagnétisme et la température de blocage. La température de blocage T_B est une grandeur physique qui dépend du matériau lui-même. Elle peut être obtenue à partir du pic de la susceptibilité magnétique en fonction de la température. La phase magnétique des nanoparticules est déterminée par la température de blocage. En effet, au-dessus de cette température, un matériau ferromagnétique, antiferromagnétique ou ferrimagnétique devient super-paramagnétique. La température de blocage peut également être définie comme celle à laquelle le temps de relaxation devient égal au temps de mesure expérimental ($\tau_0 = \tau$) [35-36]. Dans ce cas, la température de blocage est exprimée par :

$$T_B = \frac{KV}{K_B \text{Ln} \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)} \quad (\text{I.7})$$

où KV est la hauteur de la barrière d'énergie, (produit de la densité d'énergie magnétique d'anisotropie K et le volume V), K_B désigne la constante de Boltzmann. τ_0 est une longueur de temps, caractéristique du matériau, appelé le temps de tentative (son inverse est appelée la fréquence d'essai). Des valeurs typiques de τ_0 sont comprises entre 10^{-9} et 10^{-10} secondes.

I.5. Anisotropie Magnétique

Les matériaux ferromagnétiques cristallins affichent des directions des aimantations dures et faciles. L'axe facile est la direction à l'intérieur d'un cristal, le long de laquelle un petit champ magnétique appliqué est suffisant pour atteindre l'aimantation de saturation. L'axe dur est la direction à l'intérieur d'un cristal, le long de laquelle un grand champ magnétique appliqué est nécessaire pour atteindre l'aimantation de saturation. Ceci est connu sous le nom d'anisotropie magnétique [38,40]. L'anisotropie magnétique a un rôle important à jouer dans le dispositif de spintronique en termes de propriétés de transport du dispositif. En effet, l'orientation de l'aimantation à l'état rémanent d'un matériau ferromagnétique est déterminée par l'anisotropie

magnétique. L'interaction dipolaire magnétique et l'interaction spin-orbite sont, en principe, les deux sources principales qui provoquent l'anisotropie magnétique. Ces deux sources seront discutées comme suit:

- L'interaction dipolaire est une interaction d'ordre à longue portée et repose sur la forme de l'échantillon.
- L'interaction spin-orbite donne la description de l'échange de couplage entre le spin des électrons et leur mouvement orbital.

I.6. Cycle d'hystérésis

Le cycle d'hystérésis est la courbe de réponse des matériaux magnétiques, à travers laquelle, ils gardent la mémoire de tous leurs états d'aimantation antérieurs par l'intermédiaire des domaines élémentaires. Le cycle d'hystérésis est observé dans les matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques en dessous de leur température critique. Le cycle d'hystérésis d'un matériau ferromagnétique dépend de la mobilité des parois de Bloch. Ces parois correspondent à une zone magnétique où l'aimantation passe d'une direction à une autre, elle-même est fonction des énergies magnétiques et du champ appliqué. Il résulte de la réorganisation des parois du domaine magnétique dans le matériau. Dans la partie suivante, nous expliquerons brièvement les quatre paramètres caractéristiques du cycle d'hystérésis [24], [41-42].

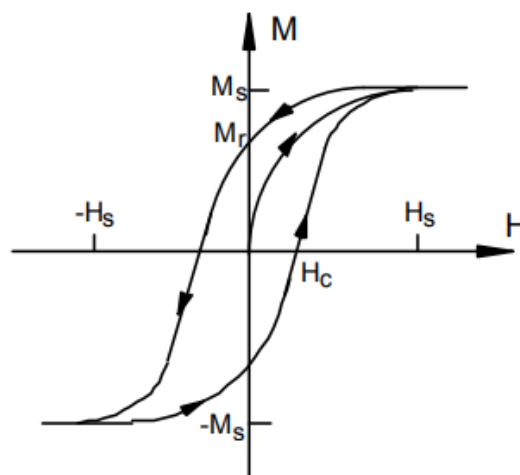


Figure I.8 : Représentation de cycle d'hystérésis.

La forme de chaque cycle dépend de la nature du matériau, des processus d'aimantation, d'induction et de la géométrie de l'échantillon. En outre, toutes les boucles d'hystérésis présentent les quatre paramètres caractéristiques.

- **Champ de saturation (H_s)** : Le champ de saturation est la valeur minimale du champ magnétique externe pour atteindre la magnétisation de saturation.
- **Aimantation à saturation (M_s)** : L'aimantation à saturation est un état atteint lorsqu'une augmentation du champ magnétique externe appliqué H ne peut pas augmenter davantage l'aimantation du matériau. $H > H_s$; $M_s(H) = \text{constante}$.
- **Aimantation de rémanence (M_r)** : L'aimantation de rémanence (ou résiduelle) est l'aimantation qui reste après la suppression du champ magnétique externe. lorsque le champ H est ramené à 0.
- **Champ coercitif (H_c)** : Le champ coercitif (H_c) est l'intensité du champ magnétique H inversé, correspond à la valeur du champ appliqué pour la démagnétisation d'un matériau.

I.7. Interactions magnétiques

Les matériaux magnétiques peuvent être considérés comme un ensemble de deux systèmes électroniques, un contenant des électrons délocalisés (bande de valence ou de conduction) et l'autre contenant les électrons des impuretés magnétiques avec un moment magnétique localisé. Les couplages d'échange peuvent être de plusieurs types :

- Couplage direct entre spins appartenant à des orbitales d'atomes voisins qui se recouvrent.
- Couplage indirect entre deux spins, via un atome intermédiaire non magnétique, ou par l'intermédiaire d'un gaz d'électron (RKKY).

Les principales interactions sont : le super-échange, le double échange et l'interaction RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya et Yoshida).

I.7.1. Super-échange

L'interaction super-échange ou échange indirecte peut être expliquée comme l'interaction entre les moments des ions lorsqu'ils sont séparés les uns des autres puis connectés à travers l'échange direct. Cependant, les ions interagissent les uns avec les autres sur une longue distance grâce à une substance non magnétique. C'est une interaction qui peut être ferromagnétique ou antiferromagnétique [43]. Dans ce type d'échange, les charges sont localisées et l'interaction dépend fortement des configurations des orbitales, ce qui donne lieu souvent à un couplage antiferromagnétique qui suit les règles de Goodenough-Kanamori-Anderson [44]. La Figure I.9, montre un schéma qui donne les différentes configurations cation-anion-cation à 180° . Dans le cas où les deux cations ont une orbitale à moitié pleine pointant dans la direction de l'anion, le couplage est direct par les règles de Hund et donne de l'antiferromagnétisme fort (cas 1 dans la Figure I.9). Le cas où les deux orbitales e_g sont vides (cas 2 dans la Figure I.9) donne également de l'antiferromagnétisme, mais faible. Si le recouvrement d'orbitales est suffisamment fort, c'est –à-dire, que les orbitales des deux cations sont suffisamment remplies, chaque spin de l'orbitale p_x va interagir avec l'électron de l'orbitale du cation adjacent en le forçant à lui être antiparallèle. Par conséquent, les spins de deux atomes des métaux de transition auront une configuration antiparallèle. Un tel mécanisme conduit à un couplage antiferromagnétique fort, c'est le super-échange. Mais au contraire, si le recouvrement d'orbitales est très faible ou nul, les deux cations auront des spins parallèle ce qui conduit à un couplage ferromagnétique.

Cas	Configuration orbitale	Couplage par super-échange
1		Couplage antiferromagnétique fort
2		Couplage antiferromagnétique faible
3		Couplage ferromagnétique faible

Cation	Description
	Orbitales t_{2g} remplies et une orbitale e_g à demi-remplie pointant dans la direction de l'anion
	Orbitale t_{2g} remplie et une orbitale e_g vide pointant dans la direction de l'anion

Anion	Description
	Orbitale $P\sigma$

Figure I.9 : Ordre magnétique en fonction du type d'orbitale des cations avoisinants (l'angle entre deux cations est fixé à 180°) et description des orbitales 3d de l'anion [45].

I.7.2. Double échange

Il s'agit d'une interaction indirecte entre des ions magnétiques de même nature chimique avec différents états de valence. Elle s'explique par un transfert électronique entre ions magnétiques via l'orbitale de l'ion diamagnétique.

I.7.3. Couplage Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY)

Ce type d'échange a été proposé la première fois comme interaction indirecte par Ruderman et Kittel et ensuite développé par Kasuya et Yosida pour donner la théorie connue sous le nom d'interaction de R_{RKY} (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) [46]. Ce modèle a été introduit pour

expliquer le ferromagnétisme dans les terres rares. Aussi, il a été appliqué pour expliquer le couplage ferromagnétique/antiferromagnétique entre deux couches minces d'un métal ferromagnétique séparées par une couche mince d'un métal non-magnétique donnant lieu à un couplage ferromagnétique ou antiferromagnétique entre les deux couches selon l'épaisseur de la couche non-magnétique. L'interaction d'échange est donc indirecte car elle n'implique pas de couplage direct entre les moments magnétiques. Le couplage d'interaction R_{KKY} peut être exprimé à travers l'équation suivante :

$$J^{RKKY}(r) = J_0 \cdot e^{-\frac{r}{l}} \cdot r^{-4} [\sin(2K_F r) - 2K_F \cdot r \cdot \cos(2K_F r)] \quad (\text{I.8})$$

avec
$$J_0 = \frac{(N_0 \beta) m^2}{4h^2 (2\pi)} \quad (\text{I.9})$$

et
$$N_0 \beta = \frac{\Delta E_v}{x_{Mn} \langle S \rangle} \quad (\text{I.10})$$

où le coefficient de Fermi est donné par : $K_F = (3/2\pi^2 n_c)^{1/3}$, n_c est la densité de trous, r est la distance entre les moments dans les emplacements i et j , $\Delta E_v = E_{v\uparrow} - E_{v\downarrow}$ est le décalage énergétique entre la couche d de l'impureté et la bande de valence. L'interaction R_{KKY} favorise l'antiferromagnétisme à courtes distances.

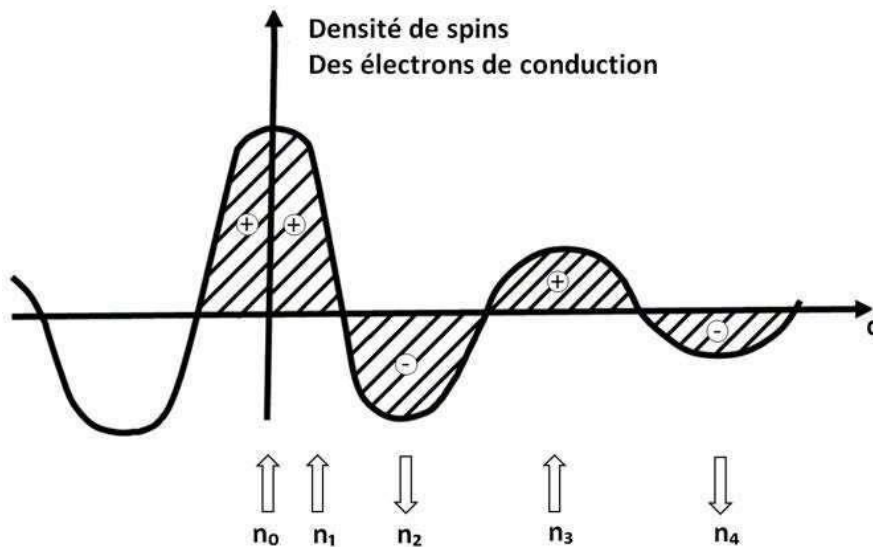


Figure I.10: Représentation schématique de l'interaction d'échange indirect R_{KKY} . (+) et (-) représentent la polarisation des électrons de conduction en fonction de l'éloignement d de l'ion magnétique situé en site n_0 . \uparrow et \downarrow représentent l'orientation des moments magnétiques.

I.8 Modèles de spin

Un modèle de spin est un modèle mathématique qui peut être de nature classique ou quantique et est utilisé en physique particulièrement pour expliquer le magnétisme. Plusieurs modèles de spin développés dépendent essentiellement des degrés de liberté et d'autres termes d'interaction en Hamiltonien. En effet, les modèles de spin classiques comprennent les modèles discrets tels que le modèle de Potts et le modèle d'Ising. On distingue aussi les modèles continus comme les vecteurs unitaires bidimensionnels du modèle XY, les vecteurs unitaires tridimensionnels du modèle classique de Heisenberg et les modèles de Blume Capel et Blume-Emery Griffiths[47-48].

I.8.1 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est un modèle mathématique qui décrit le ferromagnétisme en mécanique statistique [49]. Ce modèle est constitué de variables discrètes représentant les moments magnétiques dipolaires de spins atomiques pouvant se trouver dans l'un des deux états (+1 ou -1). En effet, les spins sont organisés dans un réseau permettant à chacun d'entre eux d'interagir avec ses voisins. Le modèle permet l'identification des transitions de phase, en tant que modèle simplifié.

Le modèle unidimensionnel d'Ising n'avait pas de transition de phase et avait été résolu par Ising lui-même dans sa thèse de 1924 [50]. Le modèle d'Ising à réseau carré bidimensionnel est l'un des modèles statistiques les plus simples pour montrer une transition de phase [51]. Ce modèle est beaucoup plus difficile et a été décrit analytiquement plus tard par Lars Onsager (1944) [52]. Le modèle d'Ising est également devenu un modèle standard pour tester les hypothèses d'échelle et d'universalité [53]. Dans ce modèle, les spins interagissent selon l'Hamiltonien suivant :

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - H \left(\sum_{i=1}^N S_i \right) \quad (\text{I.11})$$

Le paramètre J représente l'interaction de couplage d'échange entre les premiers proches voisins notés $\langle i, j \rangle$ entre les spins $S_i = \pm 1$. Les symboles (-) dans l'équation (I.12) dictent simplement le choix du signe pour le paramètre d'interaction J et le champ externe h. La simulation d'un système d'Ising de taille finie par la méthode Monte Carlo permet de calculer

les valeurs des grandeurs physiques telles que l'aimantation, l'énergie, la chaleur spécifique et la susceptibilité à une température donnée.

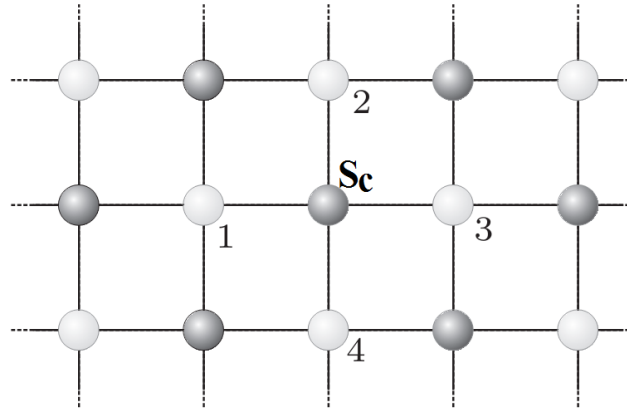


Figure I.14. Système d'Ising à deux dimensions où le spin central S_C interagit uniquement avec les 4 spins indicés 1, 2, 3 et 4.

Le premier terme de l'équation (I.11) est la sommation sur les interactions entre les spins proches voisins. J est la constante d'interaction d'échange entre les spins S_i et S_j des sites i et j du réseau. Si:

- $J > 0$, l'interaction est ferromagnétique.
- $J < 0$, l'interaction est antiferromagnétique.
- $J = 0$, il n'y a pas d'interaction entre S_i et S_j .

H fait référence à un champ magnétique externe. Le signe du champ magnétique externe explique également comment un site de spin j interagit avec le champ externe, à savoir:

- $H > 0$: tous les spins deviennent actifs dans la direction positive du champ magnétique externe.
- $H < 0$: tous les spins prennent la direction négative au champ magnétique externe.
- $H = 0$: absence de champ magnétique externe.

I.8.2 Modèles XY

Le modèle XY classique est un autre modèle important étudié abondamment en physique statistique. Il s'agit d'un modèle planaire étudié pour le cas particulier à n-vecteur lorsque $n=2$. Il décrit un système dont les degrés de liberté sont des vecteurs bidimensionnels. Dans le modèle XY, les spins sont des vecteurs à deux composantes de norme unité, qui peuvent s'orienter dans n'importe quelle direction dans un plan à deux dimensions (x, y)

L'Hamiltonien décrivant ce système est le suivant:

$$H_{XY} = -J_{i,j} \sum \langle i, j \rangle \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (\text{I.12})$$

Où θ_i varie entre $[0, 2\pi]$. Le modèle XY peut décrire des systèmes réels tels que les superfluides, les supraconducteurs et la mise en ordre dans les cristaux liquides ou la transition rugueuse [54-55]. Le modèle XY peut également être défini à partir de spins vectoriels bidimensionnels S_i de valeur absolue $|S_i|^2 = 1$.

$$H_{XY} = -J \sum \langle i, j \rangle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{I.13})$$

I.8.3 Modèle d'Heisenberg

Le modèle classique de Heisenberg est l'un des modèles utilisés en physique statistique pour décrire le ferromagnétisme et d'autres phénomènes. En effet, le modèle de Heisenberg est un modèle étudié en mécanique statistique et spécialement utilisé dans l'étude des points critiques et des transitions de phase de systèmes magnétiques, dans lequel les spins des systèmes magnétiques sont traités mécaniquement de façon quantique. Dans le modèle prototype d'Ising, défini sur un réseau en dimension D, à chaque site du réseau, un spin $S_i = \pm 1$ représente un dipôle magnétique microscopique auquel le moment magnétique est soit ascendant, soit abaissé. De plus, il existe une version multipolaire du modèle de Heisenberg appelée interaction d'échange multipolaire.

En effet, les spins d'Heisenberg sont représentés soit par des vecteurs à trois composantes S_x , S_y et S_z tel que $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 1$, ou bien par deux angles variables θ et Φ en coordonnées sphériques [56,59].

L'Hamiltonien du modèle de Heisenberg est défini comme suit :

$$H_{Heis} = -J_{i,j} \sum \langle i, j \rangle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum \langle i, j \rangle H \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{I.14})$$

Avec

J : l'interaction de couplage d'échange,

H : le champ magnétique externe.

Le modèle d'Heisenberg est un modèle de spin qui permet de traiter directement la dépendance en spin d'un système de plusieurs électrons.

I.8.4. Modèles de Blume-Capel et Blume-Emery-Griffiths (BEG)

Le modèle de Blume-Capel est parmi les modèles les plus étudiés en physique statistique. Il correspond au modèle d'Ising à l'état ferromagnétique à spin 1, avec un couplage d'interaction d'échange entre les plus proches voisins sous l'influence du champ cristallin. Le

D'autre part, le modèle de Blume-Emery-Griffiths (**BEG**) est un modèle de réseau simple qui présente des transitions de phase de premier et de second ordre. Son introduction a été en 1971, en tant que modèle de type Ising, qui capture le diagramme de phase du mélange $^3\text{He} - ^4\text{He}$. Par la suite, il a été utilisé pour décrire les systèmes caractérisés par trois états de spin. Il est l'un des rares modèles simples qui donne à la fois la transition de phase du premier ordre et du second ordre. Le modèle a été étudié et généralisé de manière approfondie [60-61].

Le modèle Blume-Emery-Griffiths est décrit par l'Hamiltonien H_{BEG} :

$$H_{BEG} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (\text{I.15})$$

$\langle ij \rangle$ indique que la somme est restreinte aux sites des plus proches voisins. J et K sont, respectivement, l'interaction bilinéaire et l'interaction biquadratique. Δ et H sont le champ cristallin et le champ magnétique, respectivement.

Pour le cas particulier où $K=0$, le modèle de Blume-Emery-Griffiths se réduit en modèle de Blume-Capel.

I.8.5. Modèle de Potts

En physique statistique, le modèle de Potts est une généralisation du modèle d'Ising, apart que les spins sur chaque site en réseau peuvent prendre plus de deux valeurs différentes [62]. Généralement, ces valeurs sont représentées par des nombres entiers positifs supérieurs ou égaux à 1. Un modèle de Potts de type q est un modèle de spin dans lequel il peut exister q valeurs de spin différentes, avec $q \geq 2$. Les valeurs de spin sont normalement désignées par les chiffres $1, 2, \dots, q$.

L'Hamiltonien de Potts s'écrit comme suit:

$$H_{potts} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{S_i, S_j} \quad (\text{I.16})$$

Avec $\delta_{i,j}$ est le symbole de Kronecker qui satisfait :

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} \mathbf{1} & \text{si } i = j, \\ \mathbf{0} & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (\text{I.17})$$

Pour $q=2$, le modèle de Potts et le modèle d'Ising sont identiques. Par conséquent, l'équation

(I.16) deviendra de la forme suivante :

$$\mathcal{H}_{potts} = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} 2 \left(\delta_{S_i, S_j} - \frac{1}{2} \right) - \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2} J \quad (\text{I.18})$$

Avec,

$$\begin{cases} \mathbf{Si} \ \mathbf{Si} = \mathbf{Sj} \Rightarrow 2 \left(\delta_{S_i, S_j} - \frac{1}{2} \right) = \mathbf{1}, \\ \mathbf{Si} \ \mathbf{Si} \neq \mathbf{Sj} \Rightarrow 2 \left(\delta_{S_i, S_j} - \frac{1}{2} \right) = \mathbf{-1}. \end{cases}$$

Coté simulation, ce modèle reste simple à utiliser. La seule contrainte est l'existence de multiples choix pour la nouvelle orientation à laquelle le spin peut retourner. La manière la

plus adéquate pour procéder à une simulation de Monte Carlo consiste à choisir aléatoirement les autres q états à l'aide d'un générateur de nombres aléatoires. Une fois de plus, une table de probabilités de retournement peut être construite pour rendre l'algorithme assez efficace. Les modèles simples de Potts de type q sur les réseaux périodiques ont des transitions de premier ordre pour $q > 4$ en deux dimensions et pour $q > 2$ en trois dimensions. Pour le cas de q proches des valeurs critiques, les transitions deviennent très faibles de premier ordre et il devient assez difficile de différencier l'ordre de la transition sans avoir préalablement connaissance du résultat correct [63].

I.9 Simulations Monte Carlo

Récemment, la modélisation et la simulation informatiques ont marqué un développement très important dans plusieurs domaines tels que les propriétés physiques. La modélisation est un ensemble de techniques et d'approches pour étudier et analyser les problèmes physiques et mathématiques à l'aide des ordinateurs. Des méthodes de simulation numérique sont également utilisées pour interpréter les données liées à l'expérimentation à large spectre, en particulier les zones qui ne peuvent être réalisées expérimentalement. Par conséquent, les calculs théoriques sont utilisés pour prédire les comportements de composés dans des conditions expérimentales très difficiles telles que des zones extrêmes de température ou de pression. Les méthodes de calcul sont utiles pour synthétiser de nouveaux systèmes difficiles à tester expérimentalement, par exemple les Nanomatériaux.

I.9.1 Équation Maître et Estimateur

La méthode de Monte Carlo repose sur la simulation de la fluctuation aléatoire d'un état à un autre pour un système. En effet, la probabilité d'apercevoir un système dans un état 'a' pendant la simulation est équivalent au poids de cet état dans le système réel. Cela exige le choix d'une règle qui gère le passage d'un état à un autre pendant la simulation [64,66]. Premièrement, nous allons introduire les enchainements physiques qui établissent l'équation maître :

$$\frac{dp_a}{dt} = \sum_b (p_b(t)w_{ba} - p_a(t)w_{ab}) \quad (\text{I.19})$$

où $p_a(t)$: la probabilité de trouver le système dans la configuration 'a' à l'instant t connaissant la distribution des probabilités à l'instant initial.

w_{ab} : la probabilité de passage de la configuration de 'a' à 'b' par unité de temps.

Les probabilités w_{ab} sont choisies de façon que la solution d'équilibre de l'équation maîtresse relève de la distribution de Boltzmann p_a donnée par :

$$p_a = \frac{e^{-\frac{E_a}{kT}}}{Z} \quad (\text{I.20})$$

avec E_a l'énergie de l'état 'a', T est la température, k est la constante de Boltzmann et Z est la fonction de partition du système.

Pour calculer l'estimation des quantités observables par sommation sur tous les états 'a' du système et sur leurs probabilités respectives, nous écrivons :

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_a Q_a e^{-\beta E_a}}{\sum_a e^{-\beta E_a}} \quad (\text{I.21})$$

Où $\beta = \frac{1}{kT}$, T est la température absolue, k est la constante de Boltzmann. E est l'énergie interne englobant les interactions qui gèrent le comportement du système dont la somme se fait sur tous les états de spin.

Dans les systèmes plus grands, il est préférable de faire la moyenne sur un sous-ensemble d'états, mais cela génère une certaine inexactitude dans le calcul. Les techniques de Monte Carlo constituent un choix aléatoire d'un sous ensemble d'états $\{a_1 \dots a_M\}$ d'une distribution de probabilité p_a que nous spécifions. La meilleure estimation de la quantité Q sera alors donnée par :

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{a_i} p_{a_i}^{-1} e^{-\beta E_{a_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{a_j}^{-1} e^{-\beta E_{a_j}}} \quad (\text{I.23})$$

Une estimation de Q sur un modèle réduit est donnée par les équations (I.24) et (I.25) où on se rapproche de la vraie valeur de $\langle Q \rangle$ de plus en plus quand il y a l'augmentation de nombre M d'états dans l'échantillon. Ceci peut être exprimé comme suit :

$$\langle Q \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} Q_M = Q_M \quad (\text{I.24})$$

La détermination de M est donc demandée pour une meilleure expression de Q . Pour cela, une considération d'une équiprobabilité entre les états du système est suffisante. C'est-à-dire tous les p_a sont identiques [67,69], d'où :

$$\begin{aligned}
Q_M &= \frac{\sum_{i=1}^M Q_{ai} p_a^{-1} e^{-\beta E_{ai}}}{\sum_{j=1}^M p_a^{-1} e^{-\beta E_{aj}}} \\
&= \frac{\sum_{i=1}^M Q_{ai} e^{-\beta E_{ai}}}{\sum_{j=1}^M e^{-\beta E_{aj}}}
\end{aligned}
\tag{I.25}$$

I.9.2 Principes de la simulation Monte Carlo

La simulation Monte Carlo est basée sur les paramètres suivants :

- l'échantillon important,
- Chaîne de Markov,
- L'ergodicité,
- La balance détaillée,
- Le taux d'acceptation.

- **l'échantillon important**

Le choix d'un échantillon contenant les états dominants constitue le concept de la méthode de Monte Carlo. Ce processus s'appelle l'échantillon important. Les états de l'échantillon sont distribués selon la distribution de probabilité de Boltzmann donnée dans l'équation (I.21) pour une estimation améliorée. Cette distribution est la forme la plus utilisée de l'échantillon important [70-71]. L'estimation Q_M devient :

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{ai}
\tag{I.26}$$

Par conséquent, le concept d'échantillon important est de créer une chaîne de Markov appropriée dans laquelle les configurations sont choisies en fonction de leur poids, suivant la probabilité de Boltzmann [72-73].

- **Chaîne de Markov**

Dans la simulation Monte Carlo, le côté le plus délicat est celui de la génération d'un ensemble arbitraire appropriée des états en fonction de la distribution de probabilité de Boltzmann [74]. Autrement dit, il n'est pas possible de choisir aléatoirement certains états puis les accepter ou les rejeter avec une probabilité proportionnelle à $e^{-\beta E_a}$ puisque le résultat ne sera qu'un échantillonnage hasardeux. En l'occurrence, il y a un risque de répéter

virtuellement certains états autant que leurs probabilités sont exponentiellement petites. Pour s'échapper de cette problématique, les algorithmes des méthodes Monte Carlo se servent de la chaîne de Markov pour choisir les états considérés [75-76].

La chaîne de Markov est le mécanisme qui génère un état 'b' à partir d'un autre état 'a'. L'évolution de la chaîne de Markov est donnée par l'équation:

$$\frac{dP(S_a,t)}{dt} = -\sum_a W(a \rightarrow b)P_a(t-1) + \sum_b W(b \rightarrow a)P_b(t-1) \quad (\text{I.27})$$

Où,

$W(a \rightarrow b)$ et $W(b \rightarrow a)$ représentent les probabilités de transition de l'état a à b et vice-versa et t est l'heure du processus de Markov. Le premier terme correspond à toutes les transitions possibles vers l'état a, tandis que le second représente toutes les transitions possibles vers l'état b.

L'état généré n'est pas toujours le même. Il balaye le système en recherchant de nouveaux états avec la probabilité de transition $W(a \rightarrow b)$ sur laquelle il impose deux conditions:

- La probabilité de transition est constante dans le temps;
- La probabilité de transition dépend des propriétés du système des états a et b.

Cela correspond au fait que la probabilité de transition $W(a \rightarrow b)$ d'un état a à un autre b du processus de Markov est toujours constante et doit satisfaire la relation:

$$\sum_a W(a \rightarrow b) = 1 \quad (\text{I.28})$$

$W(a \rightarrow a)$ n'est pas obligatoirement nul.

Dans la simulation Monte Carlo, le processus de Markov est utilisé à plusieurs reprises pour générer une chaîne de Markov des états. Par ailleurs, il est utile d'imposer deux nouvelles conditions au processus de Markov, notamment l'ergodicité et la balance détaillée [77].

- **Ergodicité**

L'Ergodicité est une condition qui permet le passage d'un état du système au cours du processus de Markov par n'importe quel état initial pour un nouvel état. Ce qui est indispensable pour la génération des états avec leurs probabilités de Boltzmann. En effet, chaque état b apparaît avec une certaine probabilité non nulle p_b dans la distribution de Boltzmann. Ainsi cet état accède à partir d'un autre état distinct de a sans aucun problème. Le processus de l'état initial est repris pour le nouvel état [78]. De plus, cette condition

d'ergodicité n'est pas satisfaite si toutes les probabilités de transition à partir d'un état donné sont nulles.

- **Balance détaillée**

La balance détaillée garantit que la distribution générée après que le système considéré atteint l'équilibre n'est qu'une distribution de probabilité de Boltzmann. Dans le cas d'équilibre, les taux de transition à partir d'un état et vers le même état sont égaux [79]. On écrit donc :

$$\sum_b p_a W(a \rightarrow b) = \sum_b p_b W(b \rightarrow a) \quad (\text{I.29})$$

A partir de :

$$\sum_b W(a \rightarrow b) = 1 \quad (\text{I.30})$$

On a

$$p_a = \sum_b p_b W(b \rightarrow a) \quad (\text{I.31})$$

La distribution p_a constituera un état d'équilibre d'après la dynamique du processus de Markov. En effet, nous considérons que les probabilités de transition $W(a \rightarrow b)$ sont les éléments de la matrice de Markov. Prenant $q_a(t)$, en cas de mesure de temps mis dans chaque état le long de la chaîne de Markov, la probabilité d'être dans l'état b à un instant $t+1$ est donnée par :

$$q_b(t+1) = \sum_a w(a \rightarrow b) q_a(t) \quad (\text{I.32})$$

En notation matricielle, la formule I.32 peut s'écrire comme suit :

$$Q(t+1) = W \cdot Q(t) \quad (\text{I.33})$$

Avec $Q(t)$ représente le vecteur dont les coordonnées sont les différents poids statistiques $q_a(t)$. À l'état d'équilibre, le processus de Markov obéira à :

$$Q(\infty) = W \cdot Q(\infty) \quad (\text{I.34})$$

Cependant, il est également possible au processus d'atteindre l'équilibre dynamique par rotation de Q sur toute la chaîne, $Q(\infty)$ devient sous la forme :

$$Q(\infty) = W^n \cdot Q(\infty) \quad (\text{I.35})$$

Avec n , la longueur du cycle limite.

En réalité, L'équation (I.31) ne garantit pas l'équilibre défini par la distribution. Car dans le

cas du choix d'une probabilité de transition afin de satisfaire à l'équation (I.31), la chaîne de Markov atteint une seule probabilité d'équilibre de distribution p_a . Néanmoins, un nombre quelconque de cycles limites de la forme (I.35) peut se générer aussi. Pour surmonter Cette difficulté, on impose la condition de balance détaillée donnée par :

$$p_a w(a \rightarrow b) = p_b w(b \rightarrow a) \quad (\text{I.36})$$

Cette condition écarte la contrainte du cycle limite. Lorsque le temps tend vers l'infini, $Q(t)$ tend exponentiellement vers le vecteur propre correspondant à la plus grande valeur propre. Par conséquent, l'équation (I.31) peut se définir comme suit :

$$P = W.P \quad (\text{I.37})$$

À l'équilibre, $Q(t)$ tend vers P alors que le temps s'approche de l'infini. Les systèmes réels satisfont à la condition de la balance détaillée.

Pour que la distribution de Boltzmann soit équilibrée, une condition supplémentaire est donnée par :

$$\frac{w(a \rightarrow b)}{w(b \rightarrow a)} = \frac{p_a}{p_b} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{I.38})$$

Les équations (I.31) et (I.37) représentent la base pour le choix de la transition de probabilité $W(a \rightarrow b)$. Le but essentiel est donc de déterminer un programme qui constitue la chaîne de Markov en fonction des probabilités de transition. Le programme doit fonctionner assez longtemps pour s'assurer que $q_a(t)$ tend à la distribution de Boltzmann p_a à l'équilibre.

- **Taux d'acceptation**

Les méthodes standard existantes ne répondent pas parfois aux besoins de chaque nouveau problème. C'est pour cela, de nouveaux algorithmes sont conçus pour des besoins spécifiques, ainsi nous proposons plusieurs processus de Markov. Il convient de noter que lorsqu'il est difficile pour nous de prédire le processus de Markov qui donne le bon résultat de la transition, nous avons recours au taux d'acceptation pour trouver de bonnes probabilités de transition pour tous les processus de Markov [74], [79-80]. Ainsi, la probabilité de transition peut être donnée par :

$$W(a \rightarrow b) = g(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b) \quad (\text{I.39})$$

Où, $g(a \rightarrow b)$ est la probabilité de sélection. Cette probabilité permet de générer un nouvel état b à partir de l'ancien état a par un algorithme.

$A(a \rightarrow b)$ est la probabilité d'acceptation. Cette probabilité est pour accepter le changement d'état.

La valeur de la probabilité d'acceptation, également appelée acceptance et est aléatoire entre 0 et 1. Si $A(a \rightarrow b) = 0$ pour toutes les transitions, cela revient certainement à dire que:

$$\mathbf{W(a \rightarrow a) = 1.} \quad \text{(I.40)}$$

$$\frac{W(a \rightarrow b)}{W(b \rightarrow a)} = \frac{g(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b)}{g(b \rightarrow a)A(b \rightarrow a)} \quad \text{(I.41)}$$

Où, $\frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} \in [0, \infty]$.

Les termes $g(a \rightarrow b)$ et $g(b \rightarrow a)$ peuvent prendre toutes les valeurs possibles. Pour éviter que l'algorithme soit lent, l'acceptation choisie doit être proche de 1. Afin de créer l'algorithme de Monte Carlo, nous allons créer un algorithme qui générera les états successifs simplement avec les données de $g(b \rightarrow a)$, puis sélectionnez les états utiles pour la probabilité d'acceptation.

I.9.3 Temps d'équilibre

Dans la méthode Monte Carlo, on ne peut pas considérer toutes les configurations possibles. Par contre, les configurations négligées en majorité sont les moins probables et donc influencent peu les résultats. En effet, la fonction de probabilité de transition élimine les configurations moins probables. Prenons l'exemple pour une température assez faible, le cas d'un spin orienté vers le bas est quasiment impossible qu'il soit dans un domaine de spins orientés vers le haut. Afin que le résultat ne dépende pas de la configuration initiale et dans le but d'atteindre l'équilibre, on fait tourner le programme longtemps. Ce temps est appelé temps d'équilibre [81-82]. Après l'équilibre, on calcule sur une nouvelle période l'estimation de la grandeur physique qui nous intéresse par l'expression suivante :

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{ai} \quad \text{(I.42)}$$

Afin de visionner l'équilibre, une quantité physique est tracée, telle l'aimantation ou l'énergie. Après l'équilibre, la quantité physique se stabilise et seules les fluctuations persistent. Dans des cas, il se peut que le système reste dans un minimum local d'énergie. Pour sortir de cette problématique, on choisit différentes configurations initiales.

I.9.4. Mesures

Dès que le système atteint l'équilibre, la moyenne des grandeurs physiques voulues peut être mesurée [83]. Dans le calcul de l'énergie, on utilise la formule : $\Delta E = E_b - E_a$ qui a été calculée au cours de la simulation :

$$E_b = E_a + \Delta E \quad (\text{I.43})$$

Afin de déterminer l'aimantation, on utilise :

$$\Delta M = M_b - M_a = \sum_i S_i^b - \sum_i S_i^a = S_k^b - S_k^a = 2S_k^b, \quad (\text{I.44})$$

Avec,

$$M_a = \sum_i S_i^a \quad (\text{I.45})$$

Et,

$$M_b = M_a + \Delta M = M_a + 2S_k^b \quad (\text{I.46})$$

Ainsi, la moyenne des carrés de l'énergie et de l'aimantation peut être également calculée pour déterminer les quantités de chaleur spécifique et de susceptibilité magnétique. Pour cela, la chaleur spécifique est donnée comme suit :

$$C_v = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (\text{I.47})$$

Et la susceptibilité magnétique est donnée par :

$$\chi = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (\text{I.48})$$

I.10. Algorithmes de simulation Monte Carlo

I.10.1 Algorithme de Metropolis

Cet algorithme a été inventé par Nicholas Metropolis et ses collègues en 1953 [82] dans l'intérêt de calculer les équations d'état des mélanges de molécules en interactions.

En effet, l'algorithme de Metropolis est très utile dans les cas de simulation en transition de phase. Ainsi, il est appliqué pour illustrer les nombreux concepts généraux impliqués dans un calcul de Monte Carlo, comme le calcul des erreurs, la mesure de valeurs moyennes et l'équilibre.

En fait, cet algorithme est largement lié au choix de l'acceptation $A(a \rightarrow b)$.

Par ailleurs, il existe deux types de dynamique de simulations MC. Le premier type est

caractérisé par la présence d'une tentative de retournement à chaque étape MC par un seul spin, par contre dans le deuxième, tous les spins dans le système présentent une tentative de retournement à chaque étape MC. En outre, La deuxième dynamique est encore limitée par la grande taille du système et le temps de calcul qui pourrait être long dans ce cas, bien qu'il donne des résultats plus précis que le premier. La dynamique adoptée, dans le cas de l'application de cet algorithme sur le modèle d'Ising, consiste à faire une seule tentative de retournement à chaque étape MC [80, 84]. Dans ce cas, toutes les probabilités de sélection sont égales, et sont données par :

$$g(a \rightarrow b) = \frac{1}{N} \quad (\text{I.49})$$

où N est le nombre de spins dans le système.

Donc l'équation de la balance détaillée s'écrira comme suit :

$$\frac{W(a \rightarrow b)}{W(b \rightarrow a)} = \frac{g(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b)}{g(b \rightarrow a)A(b \rightarrow a)} = \frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{I.50})$$

$$A(a \rightarrow b) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{I.51})$$

A_0 déterminé aléatoirement. Plus les valeurs de l'acceptance $A(a \rightarrow b)$ sont grandes plus l'algorithme est plus efficace.

L'algorithme de Metropolis avec une seule dynamique de retournement est donc défini par l'acceptance suivante :

$$A(a \rightarrow b) = \begin{cases} e^{-\beta(E_b - E_a)} & \text{pour } E_b - E_a > 0 \\ 1 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{I.52})$$

De ce fait, la probabilité de transition $W(a \rightarrow b)$ a la même forme que l'acceptance. En se basant sur ce choix des probabilités de transition, le système achève un état stable où la probabilité de configuration est donnée par le terme : $e^{-\beta E_a}$, lorsque la chaîne d'états de Markov tend vers l'infini.

Pour chaque étape MC, le retournement d'un spin est toujours accepté s'il provoque une perte d'énergie. D'autre part, lorsque le flip est effectué, le système se trouve dans une nouvelle configuration qui a une énergie plus élevée, la mise à jour doit encore être acceptée avec une certaine probabilité [85-86].

Concernant le modèle d'Ising et en présence d'un champ magnétique externe, le nouvel état b est généré à partir de l'ancien état a , les deux états ne diffèrent que par le retournement d'un seul spin. Par la suite on va citer les détails pratiques qui doivent être respectés lors de l'usage

de l'algorithme de Metropolis [83], [87-88] :

- **Configuration initiale**

Théoriquement, comme déjà noté précédemment, l'état initial ne devrait, en aucun cas, influencer le nouvel état lors de la transition d'un état a vers un nouvel état b. Néanmoins, la configuration initiale doit être choisie correctement, afin d'atteindre l'équilibre plus rapidement.

- **Sélection des degrés de liberté**

Les degrés de liberté, présentant une mise à jour, peuvent être sélectionnés au hasard ou sur la base d'une permutation aléatoire. Dans certains cas particuliers, les degrés de liberté sont habituellement traités de telle sorte que tous les sites pairs sont mis à jour en premier et ensuite tous les sites impairs. Le choix du programme de mise à jour influence de près la performance quantitative, alors que le même schéma n'affecte pas le comportement qualitatif.

- **Conditions aux limites**

En général, il y a deux types de conditions aux limites : périodiques et libres. Les conditions aux limites périodiques sont généralement utilisées pour des systèmes infinis de telle sorte que le système se répète régulièrement dans toutes les directions. Bien que des conditions aux limites libres soient utilisées pour décrire des systèmes finis tels que des nanoparticules. Dans le cas de systèmes semi-finis comme, les systèmes multicouches, les systèmes de surface et les systèmes à nanomatériaux, les deux conditions aux limites peuvent être utilisées.

- **Effets de taille finie**

Dans les simulations Monte Carlo, le réseau d'un système est pris comme un outil numérique réduit par la capacité de l'ordinateur. En conséquence, la définition de la taille du réseau doit être définie correctement pour imiter les propriétés macroscopiques du système infini. Ainsi, la limite au-dessus de laquelle les grandeurs physiques ne changent pas est connue sous le nom de limite thermodynamique. Afin de définir cette limite, habituellement, on calcule une moyenne pour plusieurs tailles différentes

- **Erreurs statistiques**

Il faut premièrement résoudre le grand nombre d'étapes MC qui sont limitées par la capacité de l'ordinateur. L'équilibre est atteint à une certaine étape MC ce qui permet aux mesures

d'être effectuées. Les moyennes peuvent donc être calculées à partir de cette étape jusqu'à la dernière étape MC. Par conséquent, l'étape MC qui définit le début de l'équilibre doit être déterminée avec soin pour éviter l'effet d'erreurs statistiques qui deviennent plus grandes près du point critique.

I.13 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons défini l'origine du magnétisme en rappelant que chaque atome de la matière possède un moment magnétique atomique qui résulte des moments de spin et du moment orbital des électrons. Ensuite, on a cité plusieurs types de magnétisme selon la susceptibilité de chaque matériau et leur comportement au niveau microscopique en présence d'un champ magnétique extérieur. Grace aux diverses applications de ces matériaux, ces derniers ont pu attirer l'intérêt des scientifiques. Nous avons aussi exposé les différents types de températures de transition. Ensuite, la théorie du champ cristallin, l'anisotropie magnétique des matériaux magnétiques ont été présentés. En outre, nous avons fournis une présentation des types d'interactions aussi bien indirectes que directes.

Dans un deuxième temps, nous avons exposé la méthode de simulation Monte Carlo utilisée dans cette thèse. Cette méthode s'appuie sur l'utilisation des spécificités aléatoires pour résoudre des problèmes qui pourraient être en principes déterministes. Comme indiqué ci-dessus, la simulation de Monte Carlo est basée sur l'échantillonnage important, la chaîne de Markov, l'ergodicité, la balance détaillée et la probabilité d'acceptation. Elle est souvent adoptée pour les problématiques physiques et mathématiques.

CHAPITRE II :
COMPORTEMENT DE LA TEMPERATURE DE COMPENSATION DANS
LES STRUCTURES FERRIMAGNETIQUES DE TYPES ABA ET BAB
ETENDUES DILUEES.

II.1 Introduction

L'intérêt accordé aux études des matériaux ferrimagnétiques s'est considérablement accru ces dernières décennies [89,90], notamment en raison d'un certain nombre de phénomènes associés à ces systèmes qui présentent un grand potentiel d'applications technologiques [91-92]. Depuis la découverte du ferrimagnétisme, plusieurs modèles théoriques ont été proposés pour expliquer leur comportement magnétique [90,93]. Essentiellement, dans ces modèles, le ferromagnétisme est décrit comme une combinaison de deux ou plusieurs sous-structures couplées magnétiquement, e. g. sous-ensembles d'atomes dans le système [94]. Chaque sous-structure peut présenter des comportements thermiques différents pour son aimantation et la combinaison de ces différents comportements peut conduire à l'apparition de certains phénomènes intéressants tels que les points de compensation [95,97], i. e. des températures inférieures au point critique pour lesquelles la magnétisation totale est nulle tandis que les sous-structures individuelles restent magnétiquement ordonnées. Au départ, les effets de compensation ont été théoriquement étudiés dans des réseaux bipartites avec des amplitudes de spin différentes dans chaque sous-réseau [98,101]. Dans ce dernier cas, les systèmes sont composés d'empilés de deux types d'atomes qui ont tous le même spin-1/2 avec des propriétés magnétiques différentes et les couplages antiferromagnétiques entre atomes adjacents ont des applications technologiques importantes comme dans les enregistrements magnéto-optiques [101,104], la magnéto-résistance et l'effet magnéto-calorique [104,105]. De plus, le rôle de la dilution peut être important, car les systèmes purs ne sont pas très courants dans la nature [106,107] et la croissance contrôlée de matériaux non homogènes peut permettre la sélection du comportement physique souhaité [108,109].

Dans ce travail, nous présentons une simulation Monte Carlo des propriétés magnétiques d'un système Ising à spin-1/2 composé de deux atomes non équivalents A et B dans des matériaux ferrimagnétiques empilés. Nous considérons également la présence d'une dilution de site d'un type d'atomes. Les simulations sont réalisées avec l'algorithme de Metropolis.

Notre étude est organisée comme suit : Dans la première partie, nous avons décrit le modèle que nous avons adopté. La deuxième partie présente les principaux détails techniques de la méthode de Monte Carlo et des équations utilisées. Par ailleurs, les résultats de l'effet des paramètres d'interaction d'échange et de la dilution sont rapportés et analysés dans la troisième partie.

II.2 Hamiltonien du système

Le système étudié est un plan bi-atomes divisé en trois zones disposées sous deux formes différentes. Le premier agencement est de type ABA où les atomes A sont situés dans les première et troisième positions, tandis que les atomes B sont entre eux (dans la deuxième position, voir figure II.1a). Le second agencement qui est du type BAB est similaire au premier sauf que les positions des atomes A et B sont permutées (voir figure II.1b). Le nombre total de spins est $N_{ABA} = (2 \times N_A) + N_B = (2 \times 55) + 44 = 155$ spins pour la configuration ABA, idem, le nombre total de spins est égal à $N_{BAB} = (2 \times N_B) + N_A = (2 \times 55) + 44 = 155$ concernant la configuration BAB.

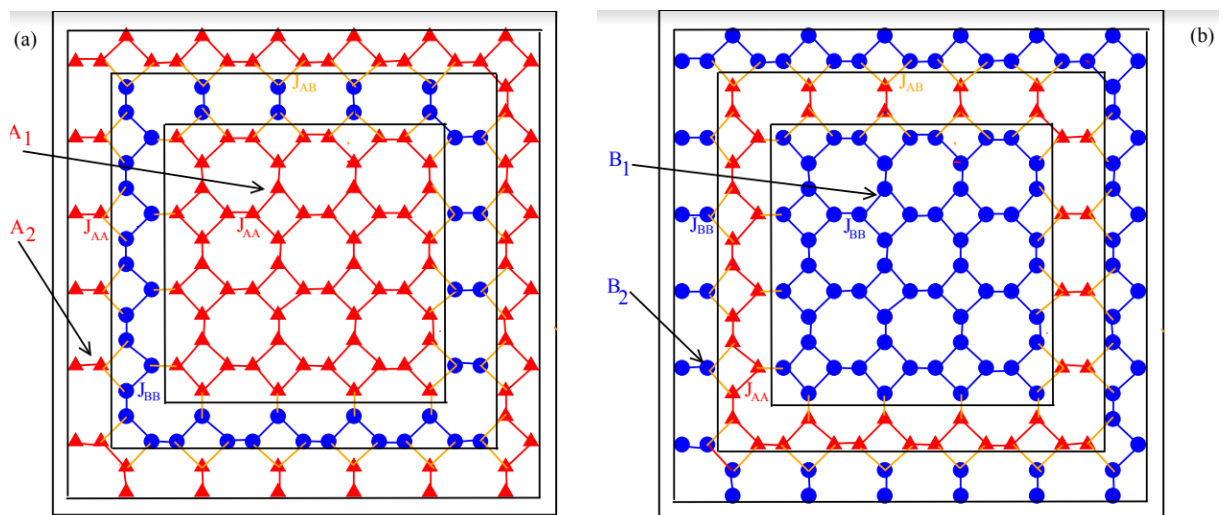


Figure II.1: Représentation schématique des matériaux ferrimagnétiques: (a) Configuration ABA, (b) Configuration BAB. Les atomes A sont représentés par des triangles rouges, tandis que les atomes B sont illustrés par des cercles bleus.

Ces arrangements ABA et BAB sont étudiés dans le cas pur et le cas dilués, afin d'étudier l'existence ou l'absence de la température de compensation et de comparer les résultats correspondant aux deux structures.

Bref, nous avons gardé le même nombre de tours, quelle que soit la nature de l'arrangement. Tous les sites sont occupés par un Ising spin-1/2, chaque spin est connecté au voisin le plus proche avec une interaction de couplage d'échange qui lui a été attribué. Pour simplifier, nous prenons (± 1) comme un spin d'Ising dans ce système.

Les couplages au sein de chaque arrangement (J_{AA} dans l'arrangement A et J_{BB} dans l'arrangement B) sont considérés positifs alors que le couplage entre arrangements A et B (J_{AB}) est supposé négatif.

L'Hamiltonien du système, y compris les interactions entre premiers proches voisins et le champ magnétique externe, est donné comme suit:

$$\mathcal{H} = -J_{AA} \sum_{\langle i \in A, j \in A \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_{BB} \sum_{\langle k \in B, l \in B \rangle} \varepsilon_k S_k \varepsilon_l S_l - J_{AB} \sum_{\langle m \in A, n \in B \rangle} \sigma_m \varepsilon_n S_n - H(\sum_{i \in A} \sigma_i + \sum_{j \in B} \varepsilon_j S_j) \quad (\text{II.1})$$

Les notations $\langle i, j \rangle$, $\langle k, l \rangle$ et $\langle m, n \rangle$ représentent les premiers sites voisins. H est le champ magnétique externe, J_{AA} , J_{BB} et J_{AB} sont les constantes d'interaction de couplage d'échange entre deux premiers atomes voisins (A-A), (B-B) et (A-B), respectivement. Les variables de spin S_i sont supposées prendre les valeurs ± 1 . Les variables d'occupation ε_i sont des variables aléatoires non corrélées prenant les valeurs $\varepsilon_i = 1$ avec une probabilité p (site occupé) ou $\varepsilon_i = 0$ avec une probabilité $1 - p$ (site vacant). Dans ce travail, la dilution ne concerne que l'arrangement B. Pour simplifier l'étude, nous définissons de nouveaux paramètres réduits comme suit: $R_{AB} = J_{AB} / J_{AA}$, $R_{BB} = J_{BB} / J_{AA}$, $t = T / J_{AA}$ et $h = H / J_{AA}$.

Comme nous l'avons dit précédemment, nos systèmes sont similaires du point de vue du nombre de spins. Chaque structure contient trois zones qui donnent par conséquent trois magnétisations différentes, à savoir m_{A1} , m_{A2} et m_B pour la configuration ABA et m_{B1} , m_{B2} et m_A pour la configuration BAB.

II.3 Simulation Monte Carlo

Afin d'étudier les propriétés magnétiques de notre système, nous effectuons des simulations de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis. Cette méthode est basée sur le processus de Markov utilisant l'Hamiltonien de l'Equation (II.1). En partant des configurations initiales, nous atteignons le point d'équilibre du système étudié après avoir effectué suffisamment d'itérations. À chaque configuration de spins, un nombre de 10^5 étapes de Monte Carlo est exécuté; les 10^4 premières configurations générées sont rejetées. À chaque étape de Monte Carlo, tous les sites du système sont balayés et des tentatives de retournement sont effectuées. Les conditions aux limites libres sont appliquées pour la taille du réseau fini. Ainsi, on calcul

l'aimantation, la susceptibilité magnétique et la température de compensation en fonction du coefficient de couplage et de la probabilité de dilution.

Pour la structure ABA, les magnétisations partielles et totale des atomes de type A et de type B sont calculées comme suit:

$$m_{A1} = \frac{1}{N_{A1}} \sum_{i \in A1} \sigma_i \quad (\text{II. 2})$$

$$m_{A2} = \frac{1}{N_{A2}} \sum_{i \in A2} \sigma_i \quad (\text{II. 3})$$

$$m_B = \frac{1}{N_B} \sum_{j \in B} \varepsilon_j S_j \quad (\text{II. 4})$$

$$m_{ABA} = \frac{N_{A1}m_{A1} + N_{A2}m_{A2} + N_B p m_B}{N_{A1} + N_{A2} + N_B} \quad (\text{II. 5})$$

Dans les équations (II. 2), (II. 3), (II.4) et (II.5), on prend $N_{A1} = N_{A2} = N_A$.

Alors que pour la configuration BAB, les aimantations partielles et totales des atomes de type A et de type B sont obtenues par:

$$m_{B1} = \frac{1}{N_{B1}} \sum_{i \in B1} \varepsilon_i S_i \quad (\text{II. 6})$$

$$m_{B2} = \frac{1}{N_{B2}} \sum_{i \in B2} \varepsilon_i S_i \quad (\text{II. 7})$$

$$m_A = \frac{1}{N_A} \sum_{j \in B} \sigma_j \quad (\text{II. 8})$$

$$m_{BAB} = \frac{p(N_{B1}m_{B1} + N_{B2}m_{B2}) + N_A m_A}{N_{B1} + N_{B2} + N_A} \quad (\text{II. 9})$$

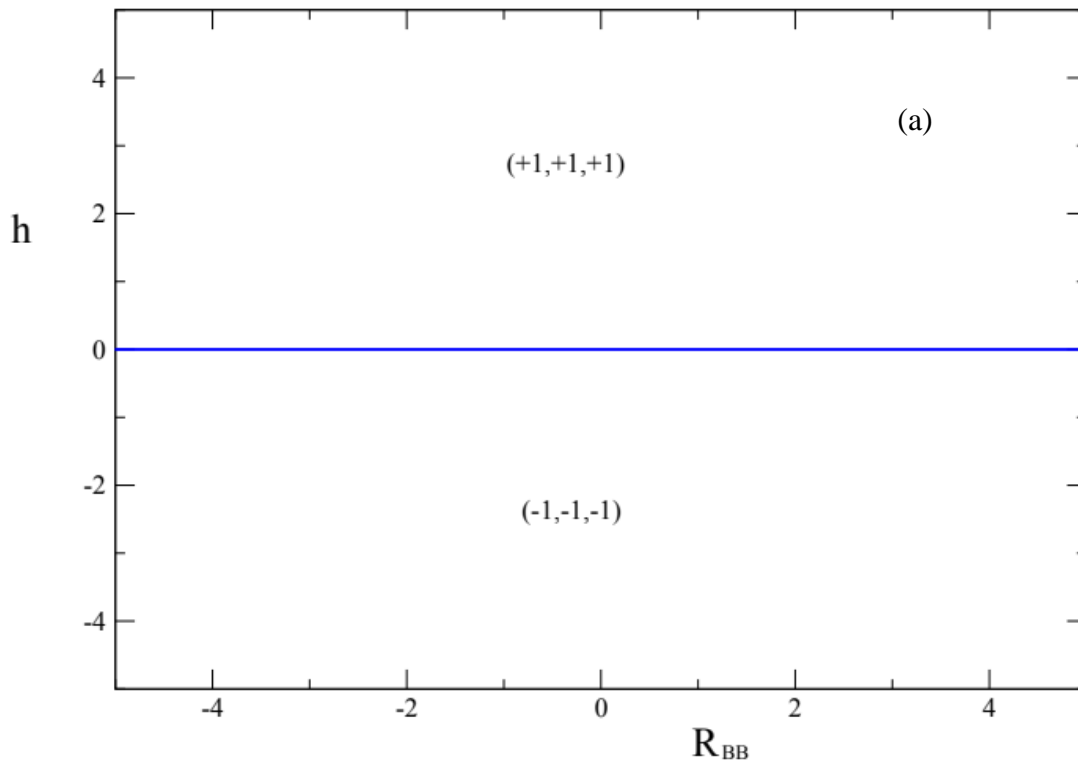
Dans les équations (II. 6), (II. 7), (II. 8) et (II. 9), nous avons $N_{B1} = N_{B2} = N_B$

II.4 Résultats et discussion

II.4.1 Etude des diagrammes phase à l'état fondamental

Dans cette section, nous déterminons les configurations stables des systèmes étudiés à la température absolue. Les diagrammes de phases sont obtenus dans les plans (R_{BB}, h) (figure II.2a) et (R_{BB}, R_{AB}) (figure II. 2b). Dans le plan (R_{BB}, h) où $R_{AB} = -0.01$, il n'y a que deux configurations stables, à savoir $(+1, +1, +1)$ pour h positif et $(-1, -1, -1)$ pour h négatif. Par ailleurs, dans le plan (R_{BB}, R_{AB}) , il y a huit configurations stables, en l'absence de champ magnétique externe. Les huit configurations obtenues dans ce cas sont: $(-1, -1, +1)$; $(-1, -1, -1)$; $(+1, +1, -1)$; $(+1, +1, +1)$ pour R_{AB} positif et $(-1, +1, +1)$; $(-1, +1, -1)$; $(+1, -1, -1)$; $(+1, -1, +1)$ pour R_{AB} négatif.

Nous déduisons des résultats de la figure II. 2 que les diagrammes de phase de l'état fondamental dépendent fortement des paramètres d'interaction d'échange.



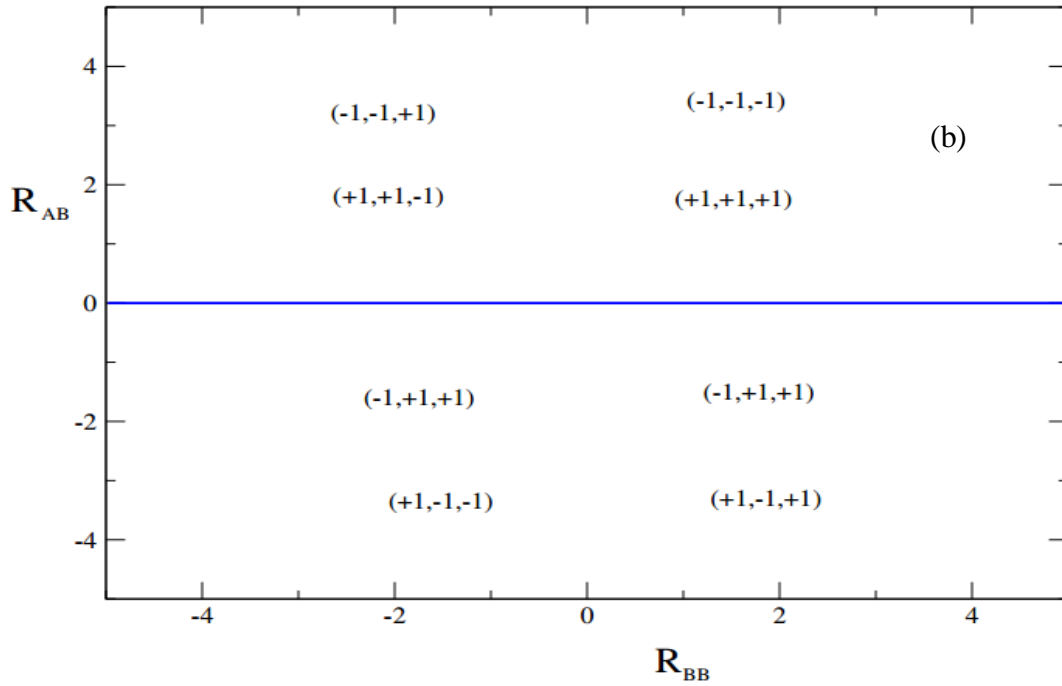


Figure II. 2: Diagrammes de phase de l'état fondamental: **(a)** dans le plan (R_{BB}, h) avec $R_{AB} = -0.01$ **(b)** dans le plan (R_{BB}, R_{AB}) avec $h = 0$.

II.4.2 Résultats de la simulation Monte Carlo

- **Cas pur ($p=1$) :**

II.4.2.1. Comportement de l'aimantation pour les deux structures ABA et BAB

Dans cette partie, nous étudions la variation des aimantations totales et partielles en fonction de la température pour des valeurs fixes du coefficient d'échange et en l'absence de champ magnétique externe. Les profils d'aimantations sont reportés sur la figure II. 3 correspondant à une taille spécifique de $N_A = 112$ (56 spins pour chaque plan A dans le système ABA) et $N_B = 44$ spins. De la même manière, $N_B = 112$ (56 spins pour chaque plan B du système BAB) et $N_A = 44$ spins. La différence réside dans les frontières de chaque plan qui se diffère l'un à l'autre.

Les figures II.3a et II.3b représentent la variation des aimantations totales en fonction de la température pour $R_{BB} = 0,5$, $R_{AB} = -0,5$ et $h = 0$, dans le cas pur ($p = 1$, aucune dilution n'est prise en compte), pour les deux configurations ABA et BAB, respectivement. Ces figures

montrent l'existence de la température de compensation (T_{comp}) correspondant à la phase super-paramagnétique du système. Un tel résultat a été observé dans la littérature [110].

La température de compensation ($T_{\text{comp}} = 2,4$) relative à la configuration ABA, donnée par la figure II.3a, est supérieure à celle de la configuration BAB ($T_{\text{comp}} = 1,7$) trouvée sur la figure 3II.b. Cette différence est due à la dominance du coefficient de couplage R_{BB} dans la configuration BAB. En fait, les atomes dominants dans le cas de la configuration BAB sont corrélés par l'interaction de couplage d'échange R_{BB} qui est inférieure au paramètre R_{AA} dans la configuration ABA.

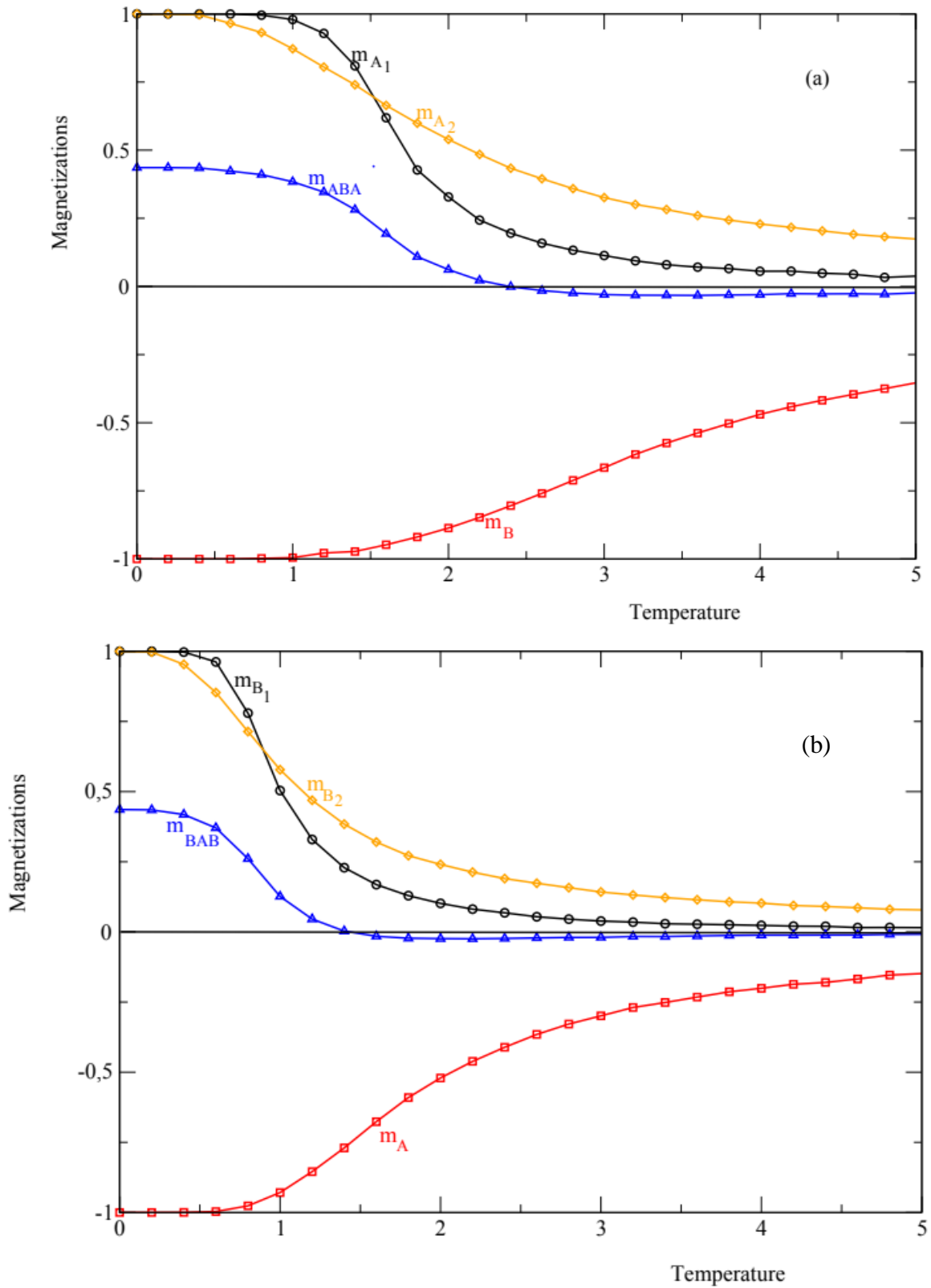


Figure II. 3: Aimantations en fonction de la température avec $R_{BB} = 0,5$, $R_{AB} = -0,5$, $h = 0$, $p = 1$:(a) Pour la configuration ABA. (b) Pour la configuration BAB.

II.4.2.2. Effet du coefficient de couplage R_{AB} sur les aimantations et la température de compensation pour les deux structures ABA et BAB

La figure II. 4 rapporte le comportement de l'aimantation totale de la configuration ABA en fonction de la température pour différentes valeurs du coefficient d'échange R_{AB} , en l'absence du champ magnétique externe. Cette figure montre que la diminution de l'aimantation totale avec la température est d'autant plus importante quand l'interaction d'échange de couplage R_{AB} diminue en valeur absolue. La figure II.4 est obtenue pour $R_{BB} = 2$, $h = 0$ et $p = 1$.

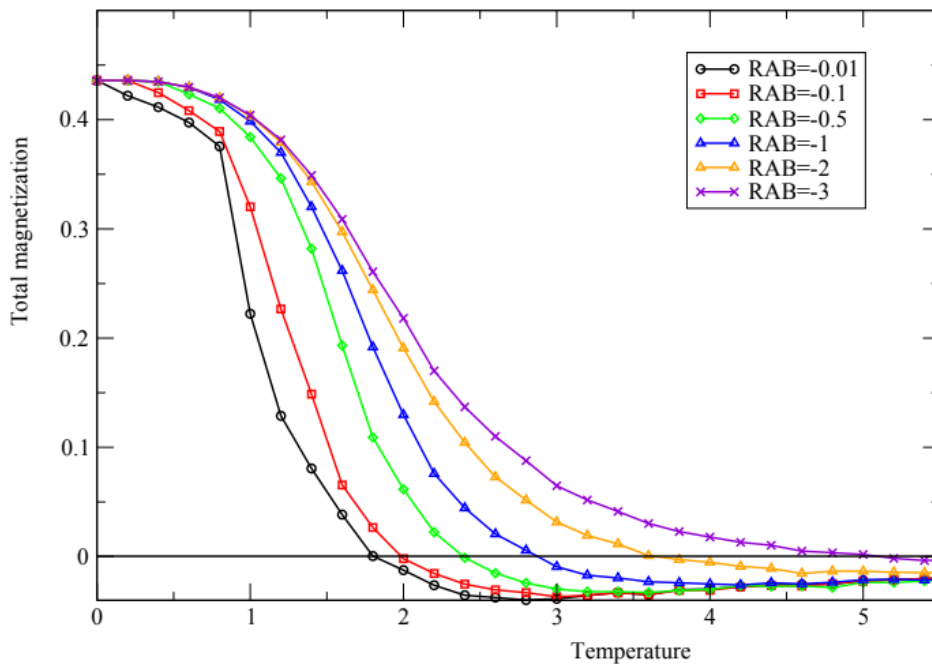


Figure II.4: Aimantation totale de la configuration ABA en fonction de la température réduite pour différentes valeurs des interactions d'échange R_{AB} avec $R_{BB} = 0,50$ et $h = 0$.

Afin de comparer les deux configurations, nous illustrons sur la figure 5, le comportement de l'aimantation totale en fonction de la température pour différentes valeurs des coefficients d'échange R_{AB} dans la configuration BAB. Cette figure est tracée en l'absence du champ magnétique externe. Dans ce cas, la température de compensation augmente quand le paramètre R_{AB} croît en valeur absolue.

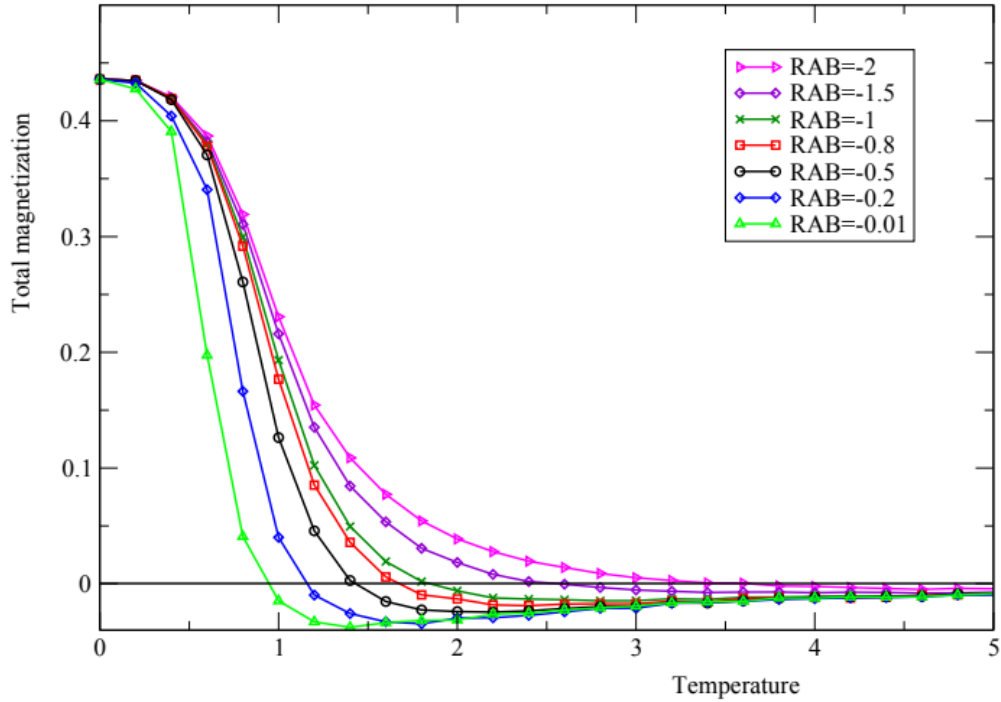


Figure II. 5: Aimantation totale de la configuration BAB en fonction de la température réduite pour différentes valeurs des interactions d'échange R_{AB} avec $R_{BB} = 0,50$ et $h = 0$.

Afin d'obtenir le comportement de la température de compensation en fonction du coefficient d'échange R_{AB} dans les deux configurations, nous avons tracé la figure II.6 dans le cas où $R_{BB} = 2$ et $h = 0$. A partir de cette figure, il est clair que la température de compensation décroît lors de la diminution de R_{AB} en valeur absolue. Ceci est dû au couplage antiferromagnétique qui lie les atomes au niveau des frontières entre les arrangements A et B. En effet, la diminution de $|R_{AB}|$ conduit à une faible interaction entre les atomes A et B conduisant à des petites valeurs de T_{comp} .

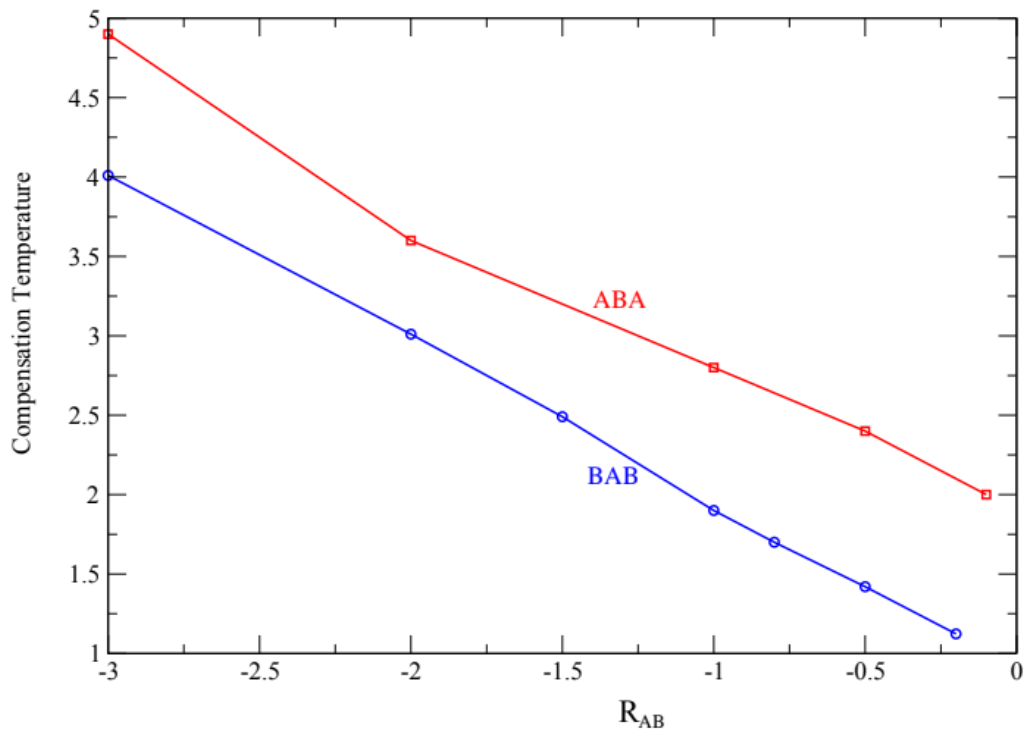


Figure II.6: Températures de compensation en fonction de R_{AB} avec $R_{BB} = 2$ et $h = 0$ dans les configurations ABA et BAB.

II.4.2.3. Effet du couplage R_{BB} sur les aimantations et la température de compensation pour les deux structures ABA et BAB

Sur la figure II.7a, nous illustrons le comportement de l'aimantation totale pour la configuration ABA en fonction de la température pour différentes valeurs du coefficient d'échange R_{BB} . Ce dernier représente l'interaction de couplage d'échange réduit entre les atomes B dans la configuration ABA. Cette figure est tracée en absence du champ magnétique externe ($h = 0$) et $R_{AB} = -0,50$.

En collectant les résultats de la figure II.7a, nous traçons sur la figure II.7b la variation de la température de compensation en fonction du paramètre R_{BB} . Cette figure montre bien que la température de compensation diminue lorsque le coefficient R_{BB} augmente.

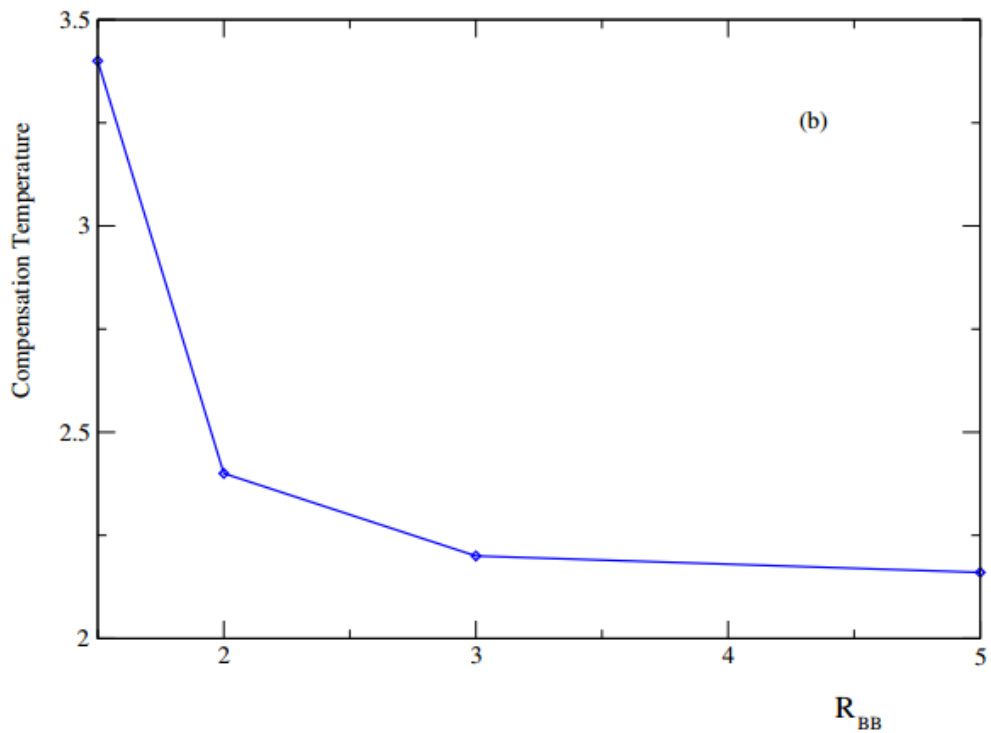
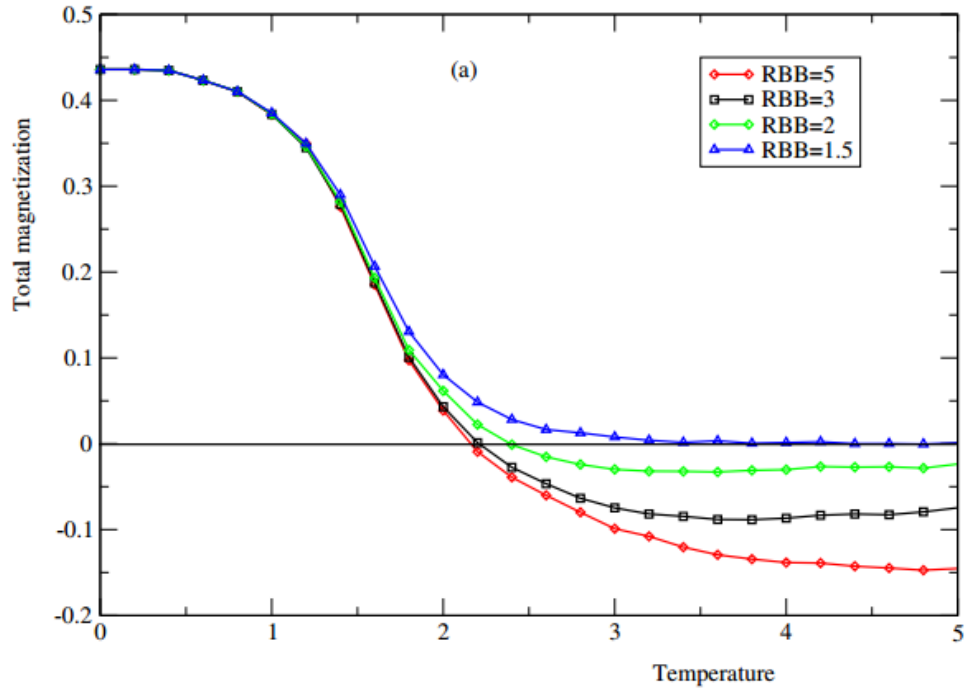
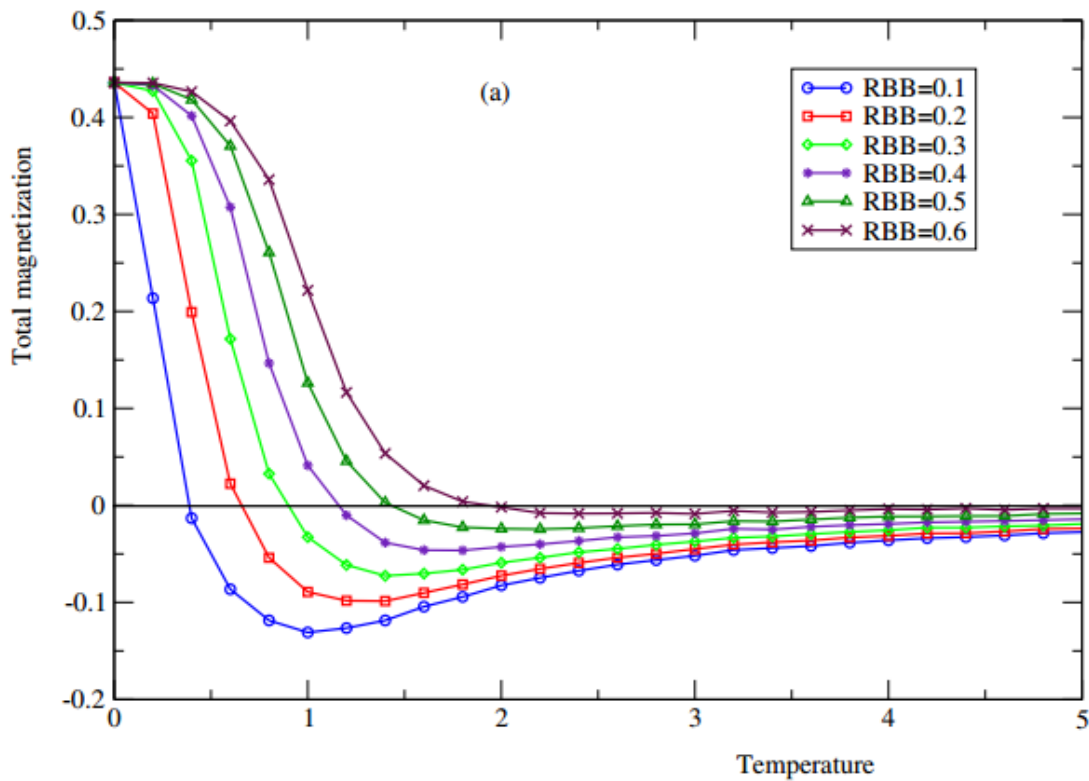


Figure II.7: Configuration ABA pour $R_{AB} = -0,50$ et $h = 0$: **(a)** L'aimantation totale en fonction des interactions d'échange R_{BB} , **(b)** La température de compensation en fonction de R_{BB} .

Sur la figure II.8a, nous présentons le comportement de l'aimantation totale pour la configuration BAB en fonction de la température pour différentes valeurs du coefficient d'échange R_{BB} , dans le cas où $h = 0$ et $R_{AB} = -0,50$. A partir de cette figure, on note que la température de compensation augmente en diminuant le coefficient de couplage d'échange R_{BB} . En effet, dans la configuration BAB, les atomes dominants sont de type B conduisant à une diminution de la valeur T_{comp} contrairement à la configuration ABA (Figure II.7a).



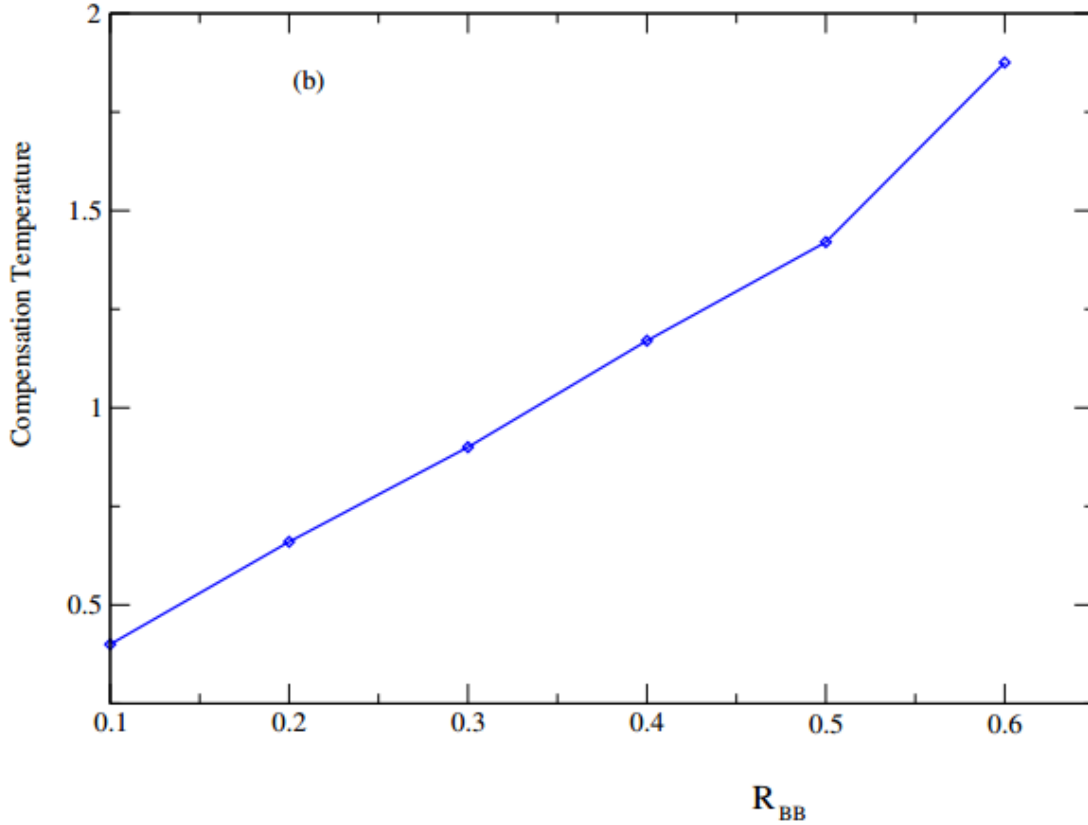


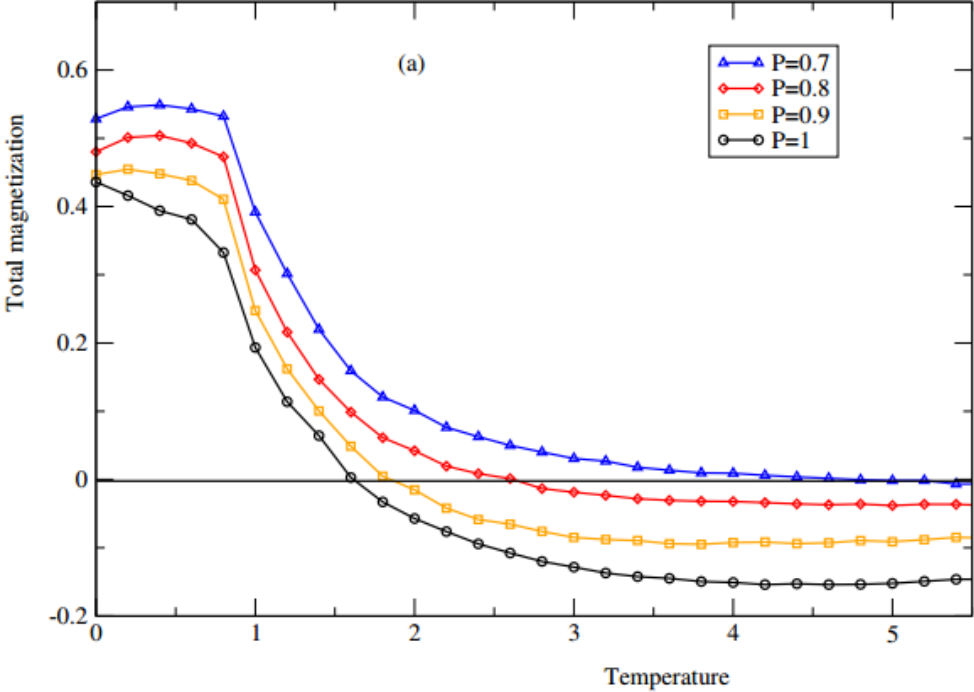
Figure II.8 : Configuration BAB avec $R_{AB} = -0,50$ et $h = 0$: **(a)** Aimantation totale en fonction des interactions d'échange R_{BB} , **(b)** Température de compensation en fonction de R_{BB} .

II.4.2.4 Effet de la dilution des atomes du plan B sur les aimantations et la température de compensation des deux structures étudiées : ABA et BAB.

Dans cette section, nous diluons uniquement la région B afin d'étudier l'effet de la probabilité de dilution p sur les deux configurations envisagées. Cette étude est faite pour des valeurs fixes de $R_{BB} = 5$, $R_{AB} = -0,01$ et en absence du champ magnétique externe.

La figure II.9a présente la variation de l'aimantation totale de la configuration ABA en fonction de la température réduite. Cette figure montre une augmentation de la température de compensation lorsque la probabilité de dilution p diminue. Nous rappelons que le taux de dilution du plan B augmente quand la probabilité p diminue ($p=1$ correspond au cas pur (pas de dilution)). Un comportement inverse est observé sur la figure II.9b qui illustre la variation de l'aimantation totale de la structure BAB en fonction de la température réduite. En effet, sur

cette figure, la température de compensation décroît quand la probabilité p diminue. Un tel résultat peut s'expliquer par le fait que dans la configuration BAB, les atomes dilués sont dominants. Par contre, dans la configuration ABA, les atomes dominants ne sont pas dilués.



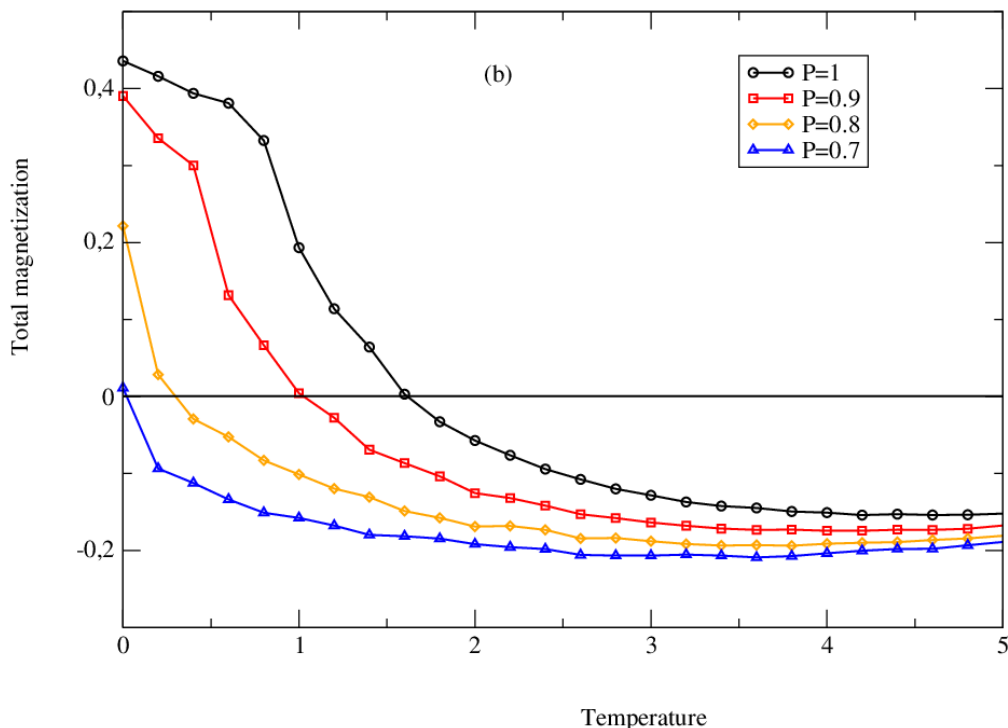


Figure II.9: Variation de l'aimantation totale en fonction de la température pour différentes valeurs de la probabilité d'occupation avec $R_{BB} = 5$ et $R_{AB} = -0,01$.
(a) configuration ABA, **(b)** configuration BAB.

La collection des résultats obtenus sur les figures II.9a et II.9b, nous permet de tracer la figure II.10 qui montre l'effet de la dilution sur la température de compensation pour les configurations ABA et BAB. De tels résultats sont obtenus pour des valeurs sélectionnées de l'interaction réduite du couplage d'échange entre les atomes B ($R_{BB} = 5$) et entre les atomes A et les atomes B ($R_{AB} = -0,01$). D'après la figure II.10, on voit clairement que pour la configuration ABA, la température de compensation diminue lors de l'augmentation de la probabilité de dilution. Cela est dû au fait que dans ce cas les atomes qui dominent la structure ABA sont de type A et la dilution n'est introduite que sur les atomes B. Alors que, pour la configuration BAB, un comportement opposé est observé car les atomes dominants sont de type B.

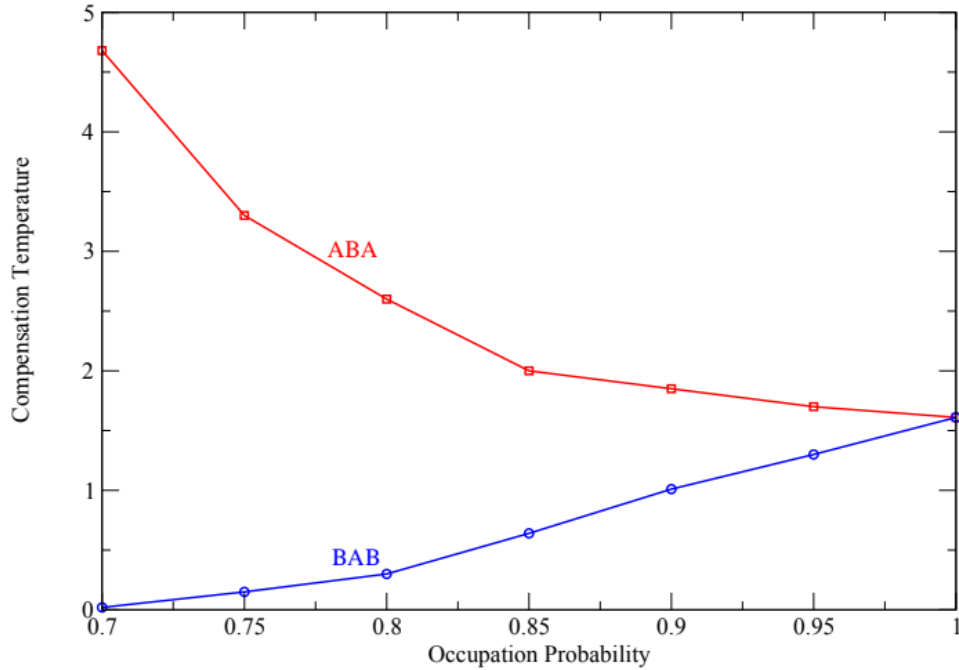


Figure II.10: Températures de compensation en fonction de la probabilité d'occupation pour $R_{BB} = 5$ et $R_{AB} = -0,01$ dans les deux configurations ABA et BAB.

II.5. Conclusion

Dans ce travail, nous avons appliqué des simulations de Monte Carlo pour étudier le comportement magnétique sur le réseau étendu de matériaux ferrimagnétiques en utilisant le modèle d'Ising. Le système étudié est formé d'aires arborées de deux types d'atomes A et B. Les interactions entre les paires d'atomes du même type (AA ou BB) sont ferromagnétiques, tandis que les interactions entre paires d'atomes de types différents (AB) sont antiferromagnétiques. Seules les régions B sont diluées avec des sites choisis au hasard avec une probabilité p (site occupé) ou une probabilité $1 - p$ (site vacant).

Nous avons établi les diagrammes de phase de l'état fondamental dans les plans (R_{BB}, h) et (R_{BB}, R_{AB}) à température absolue nulle. Les résultats de la simulation de Monte Carlo pour les configurations ABA et BAB montrent que l'aimantation totale et la température de compensation dépendent fortement des valeurs R_{AB} et R_{BB} des paramètres d'interaction d'échange réduits. En effet, dans le cas de la configuration ABA, la température de compensation augmente en diminuant la valeur de p . Par ailleurs, la configuration BAB présente des comportements opposés en fonction de la probabilité p .

CHAPITRE III :
PROPRIETES MAGNETIQUES ET THERMIQUES
D'UNE STRUCTURE DE BOROPHENE CORE-
SHELL : ETUDE PAR LA METHODE DE MONTE
CARLO

III. 1 Introduction

Récemment, les matériaux de type graphène ont attiré d'énormes attentions en raison de leurs nouvelles propriétés, telles que la résistance élevée du réseau, la mobilité électronique élevée [111], qui permet aux électrons de se déplacer librement, ainsi qu'une conductivité thermique importante [112]. Ces matériaux ont également de grandes applications potentielles en microélectronique, spintronique et dans le stockage de l'hydrogène [113,115].

En théorie, un grand processus de nanomatériaux a été mis en place pour étudier leurs propriétés magnétiques par la théorie du champ effectif (EFT). Un tel processus s'est appuyé sur des corrélations des nano fils encapsulés dans des nanotubes de carbone faisant appel au modèle d'Ising anisotrope [116,117]. De plus, l'effet de la taille du nano-système sur les propriétés magnétiques de ces systèmes a été discuté par Zhao-Ming Lu et al., en utilisant la théorie du champ effectif [118].

Le graphène avec un réseau de carbone en nid d'abeille bidimensionnel (2D) a suscité un intérêt significatif depuis sa découverte, conduisant à une expansion dans le développement de matériaux à 2D. Il existe des structures à 2D stables en silicium, germanium et étain dans le tableau périodique, appelées respectivement silicène, germanène et stanène. Ces structures monocouches présentent un réseau en nid d'abeille et une excellente conductivité électrique [119,120].

En effet, malgré ses nombreuses qualités qui font du graphène un système à 2D prometteur, il reste un semi-métal et jusqu'à présent il n'existait pas de matériau 2D stable à caractère métallique [121,122]. Récemment, il a été théoriquement montré qu'une feuille de bore atomique épais, le borophene, serait métallique avec une mobilité électronique relativement élevée ($6,6 \cdot 10^5 \text{ ms}^{-1}$) [123,125]. Il aurait en plus des valeurs de transmittance optique jusqu'à 100% dans le visible, ce qui le rend plus transparent que le graphène [126,129]. Le bore est également proche du carbone et il a été prédit de former des allotropes 2D comme leurs voisins sur le tableau périodique. La liaison bore-bore est presque aussi forte que la liaison carbone-carbone ce qui lui confère des propriétés mécaniques proches de celles du graphène. [130,132] Les premières tentatives de synthèse de structures plates à base de bore focalisées sur de petits amas, comme le B_{30} , B_{35} et B_{36} [133,138], comme base d'une structure borophene étendue en 2015 [139] puis en 2016 [140]. Les premières feuilles de borophene ont

été synthétisées sur des surfaces d'argent Ag (111) dans des conditions d'ultra vide par épitaxie [141]. De plus, il serait super-extensible et flexible, et devrait subir des transitions allotropiques induites par le stress [142,144]. Il aurait une excellente conductivité électronique [145], ce qui en fait un bon candidat pour être utilisé comme anode [146-148] ou contact électrique [149]. Il aurait également une meilleure conductivité optique que le graphène [150,152] et aurait même être supraconducteur [153-154]. Ces résultats, ainsi que les propriétés intrinsèques potentielles du borophene, ont suscité un intérêt considérable, notamment pour des applications dans le domaine du stockage d'énergie [155,156].

Dans cette étude, nous avons utilisé les simulations de Monte Carlo afin d'étudier les comportements des aimantations totale et partielles et des susceptibilités de la structure de borophene avec spins $\sigma = 5/2$ et $S = 3/2$ dans le noyau et la coquille, respectivement. De plus, le comportement de la température de compensation en fonction des couplages entre spins est étudié. Enfin, l'aimantation totale en fonction des interactions de couplage d'échange, du cristal et des champs magnétiques externes est déterminée.

Ce chapitre est organisé comme suit : dans la première section, nous allons décrire le modèle proposé. La deuxième partie présente les détails de la méthode de Monte Carlo utilisée et les équations pour simuler les propriétés magnétiques de la structure borophene 'core-shell'. La section 3 est consacrée aux résultats et aux discussions. Enfin, le chapitre se termine par une conclusion.

III.2 Modèle et théorie

Le système étudié est la structure de borophene à deux dimensions, composé d'atomes de bore (B) disposés de manière hexagonale centrée (voir figure III.1). Notre modèle est formé de deux type de spin $S = 5/2$ dans le noyau et le spin $\sigma = 3/2$ dans la coquille, présentant ainsi une structure 'core-shell'. Chaque spin est lié aux spins adjacents avec un couplage d'échange. En effet, l'interaction entre deux atomes voisins identiques est considérée comme ferromagnétique, tandis que l'interaction entre deux atomes de spins différents est supposée anti-ferrimagnétique.

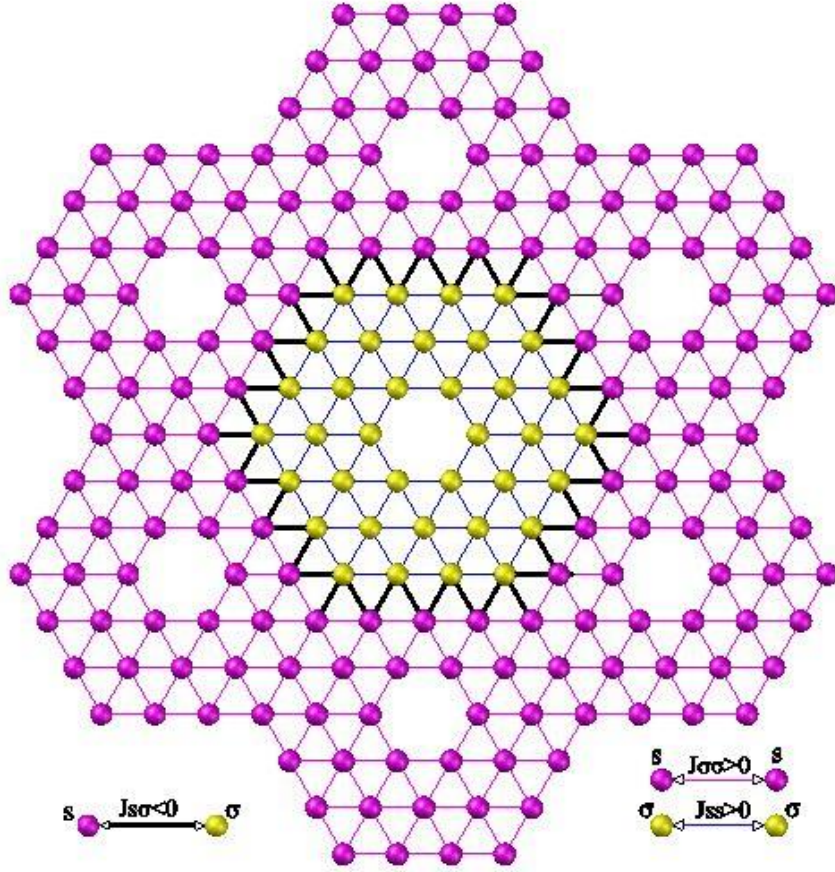


Figure III.1: Représentation schématique d'une structure de borophene

L'Hamiltonien, dans le cadre du modèle de Blume-Capel, de notre système avec des spins différents, comprend l'interaction entre plus proches voisins, le champ magnétique externe h et le champ cristallin Δ . Ce Hamiltonien est donné comme par :

$$\mathcal{H} = -J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_{ss} \sum_{\langle k,l \rangle} S_k S_l - J_{s\sigma} \sum_{\langle m,n \rangle} \sigma_m S_n - h \left(\sum_i \sigma_i + \sum_j S_j \right) - \Delta \left(\sum_i \sigma_i^2 + \sum_j S_j^2 \right) \quad (\text{III.1})$$

Où $\langle i, j \rangle$, $\langle k, l \rangle$ et $\langle m, n \rangle$ représentent les premiers sites voisins (i et j), (k et l) et (m et n), respectivement. J_{ss} , $J_{s\sigma}$ et $J_{\sigma\sigma}$ sont les coefficients de couplage d'échange entre deux premiers

atomes voisins de spin SS (dans la coquille (shell)), S- σ (entre le noyau et la coquille) et $\sigma-\sigma$ (dans le noyau (core)), respectivement (voir figure III.1).

En se basant sur l'Hamiltonien de l'équation (III.1), nous utilisons la technique standard de Monte Carlo, sous l'algorithme de Metropolis, pour calculer les différentes caractéristiques magnétiques du système étudié. Le présent système implique un nombre total de spins $N = N_S + N_\sigma = 210$, où $N_S = 174$ et $N_\sigma = 36$ sont le nombre de spins dans la coquille et dans le noyau, respectivement. Par souci de simplicité, nous adoptons dans ce qui suit les paramètres réduits suivants : $R_1 = J_{SS} / J_{\sigma\sigma}$, $R_2 = J_{S\sigma} / J_{\sigma\sigma}$, $t = T / J_{\sigma\sigma}$, $h = H / J_{\sigma\sigma}$ and $\delta = \Delta / J_{\sigma\sigma}$.

III.3 Résultats et Discussions

III.3.1 Etude des diagrammes phase de l'état fondamental

Le but de ce chapitre est l'étude des propriétés magnétiques de la structure du borophene de type 'core-shell'. Nous avons présenté sur les figures III (2a-2f) les diagrammes de phase de l'état fondamental du borophene dans différents plans en variant différents paramètres physiques.

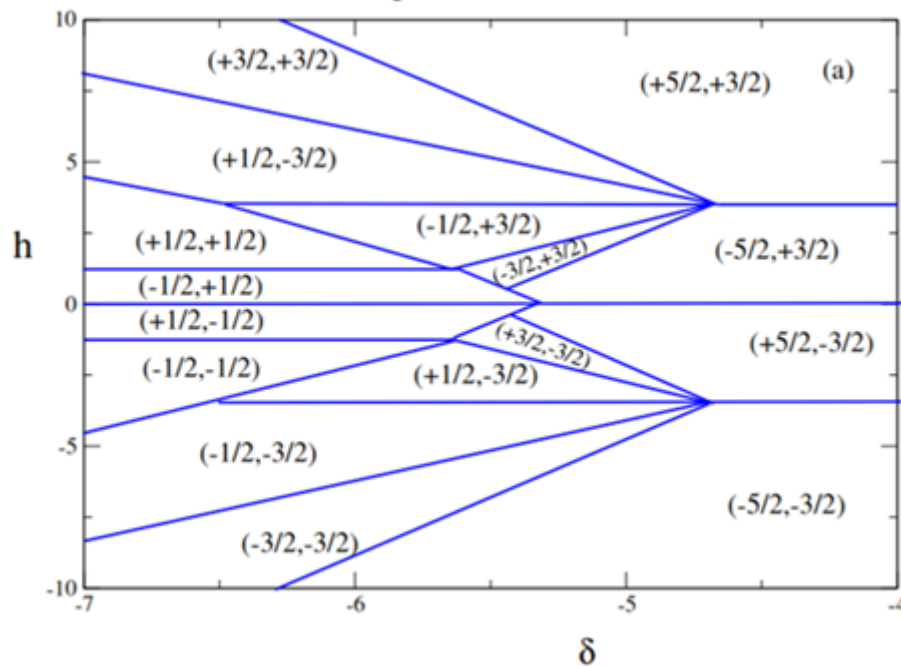
On se basant sur l'Hamiltonien donné par l'équation (III.1), nous calculons les énergies de toutes les 24 configurations possibles $((2 \times (3/2) + 1) \times ((5/2) \times 2 + 1) = 24)$. Pour cela, nous avons commencé par tracer, sur la Figure.III.2a, le diagramme de phase correspondant aux valeurs fixes de paramètres réduits du couplage : $R_1 = 1$ et $R_2 = -1$ dans le plan (h, δ) . D'après cette figure, il ressort que seulement seize configurations sont présentes: $(+3/2, +3/2)$, $(+5/2, +3/2)$, $(+1/2, -3/2)$, $(-5/2, +3/2)$, $(-3/2, +3/2)$, $(-1/2, +3/2)$, $(+1/2, +1/2)$, $(-1/2, +1/2)$, $(+1/2, -1/2)$, $(-3/2, -3/2)$, $(-5/2, -3/2)$, $(-1/2, +3/2)$, $(+5/2, +3/2)$, $(+3/2, -3/2)$, $(+1/2, +3/2)$ et $(-1/2, -1/2)$.

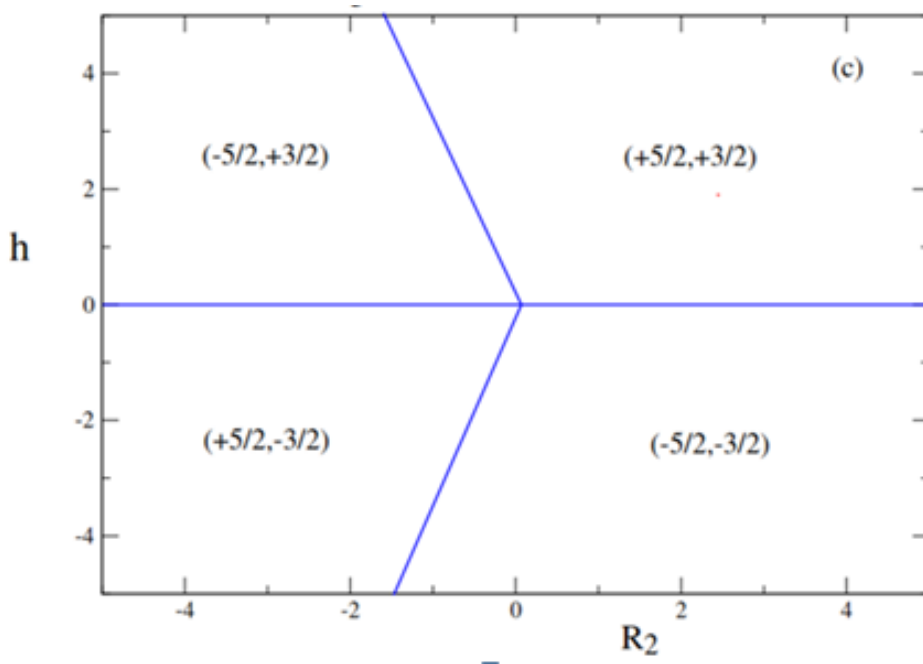
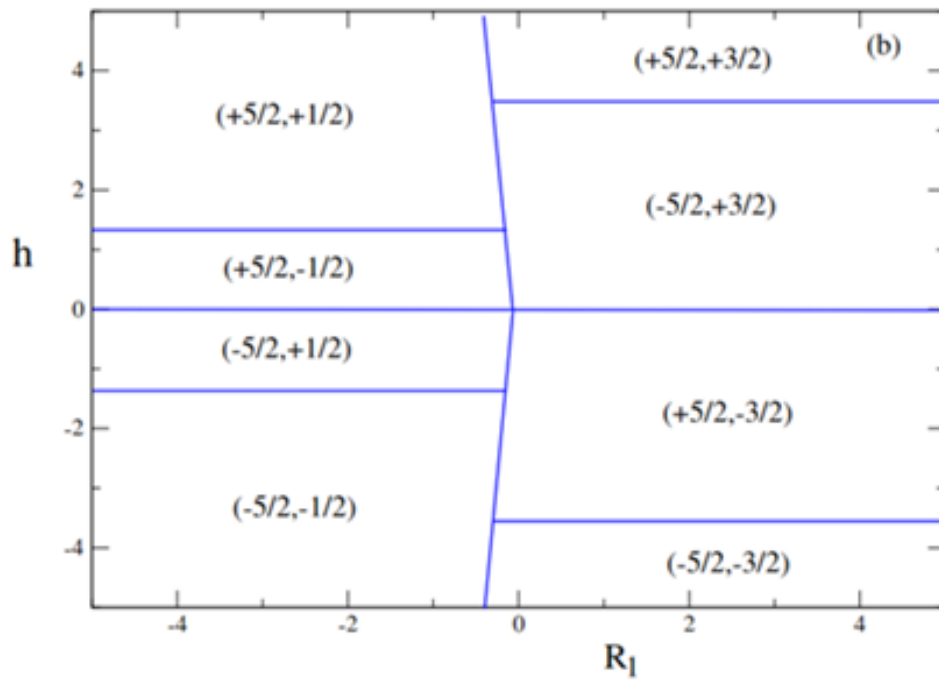
Ces différentes configurations stables apparaissent pour $\delta < 0$, du fait de la concurrence de différents paramètres physiques tel que : les interactions de couplage d'échange réduits, ainsi que le champ réduit cristallin et le champ magnétique externe.

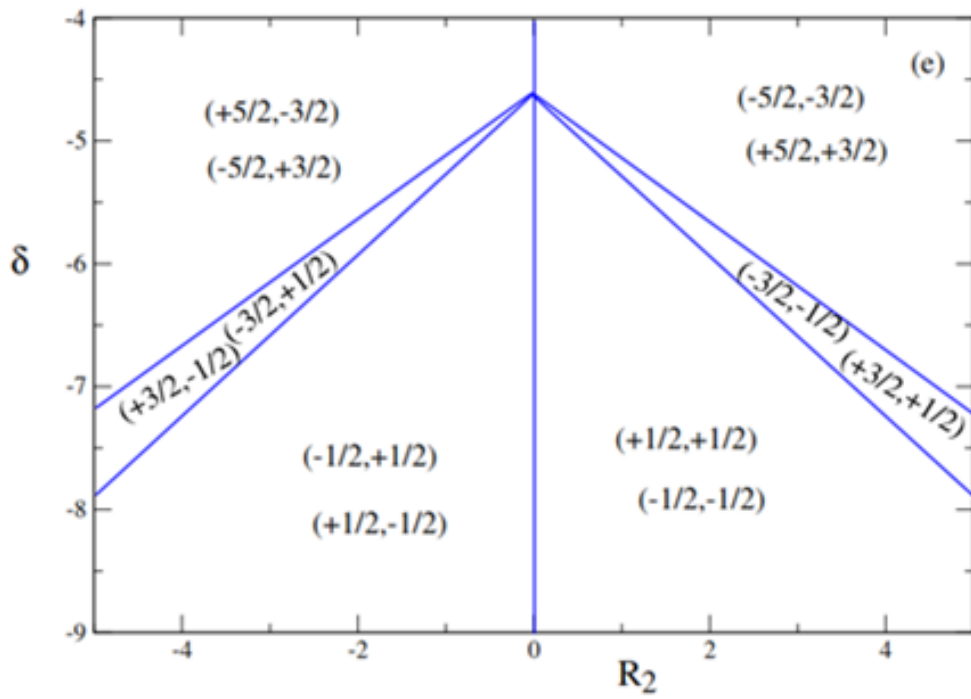
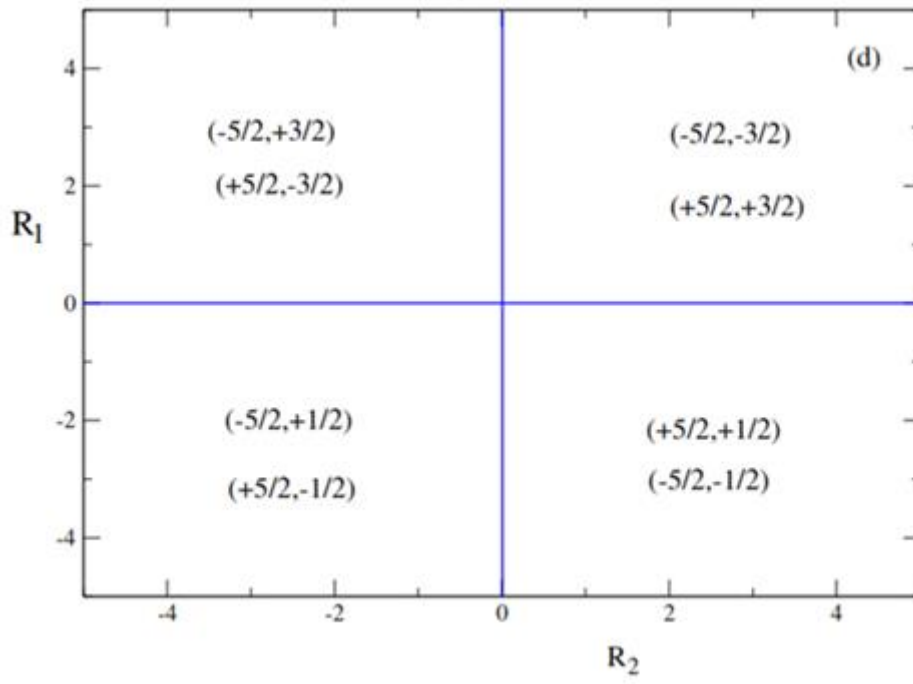
A partir de la figure III. 2b, illustrée sur le plan (h, R_1) , en l'absence de l'effet du champ cristallin et pour $R_2 = -1$, nous n'avons trouvé que huit stables à savoir : $(5/2, 1/2)$, $(5/2, 3/2)$, $(5/2, -1/2)$, $(-5/2, 3/2)$, $(-5/2, 1/2)$, $(-5/2, -1/2)$, $(5/2, -3/2)$ et $(-5/2, -3/2)$. Alors que sur la figure III. 2c, présentée dans le plan (h, R_2) , quatre phases sont stables et sont : $(-5/2, 3/2)$, $(5/2, 3/2)$,

$(5/2, -3/2)$ et $(-5/2, -3/2)$, pour $R_1 = 1$ et $\delta=0$. Cette figure présente une symétrie parfaite par rapport à l'axe du champ magnétique externe réduit $h = 0$.

En outre, l'impact des coefficients de couplage R_1 et R_2 est obtenu sur la Fig. III 2d, en l'absence à la fois du champ cristallin et des champs magnétiques externes. Cette figure montre les huit phases stables obtenues à savoir : $(-5/2,3/2)$, $(5/2,-3/2)$, $(-5/2,-3/2)$, $(5/2,3/2)$, $(-5/2,1/2)$, $(5/2,-1/2)$, $(5/2,1/2)$ et $(-5/2,-1/2)$. Par ailleurs, la figure III. 2e, tracée dans le plan (δ, R_2) pour $R_1 = 1$ et $h = 0$, montre les douze phases stables suivantes : $(-5/2,-3/2)$, $(5/2,3/2)$, $(5/2,-3/2)$, $(-5/2,3/2)$, $(-3/2,-1/2)$, $(3/2,1/2)$, $(-3/2,1/2)$, $(3/2,-1/2)$, $(-1/2,1/2)$, $(1/2,-1/2)$, $(-1/2,-1/2)$ et $(1/2,1/2)$. Enfin, sur la figure III. 2f obtenue dans le plan (δ, R_1) en l'absence du champ magnétique externe réduit et pour $R_2 = -1$, douze phases sont stables, à savoir: $(-5/2,1/2)$, $(5/2,-1/2)$, $(5/2,-3/2)$, $(-5/2,3/2)$, $(-3/2,1/2)$, $(3/2,-1/2)$, $(-3/2,3/2)$, $(3/2,-3/2)$, $(-1/2,1/2)$, $(1/2,-1/2)$, $(-1/2,3/2)$ et $(1/2,-3/2)$. Les résultats obtenus à l'état fondamental sont comparables à ceux obtenus dans la référence [157].







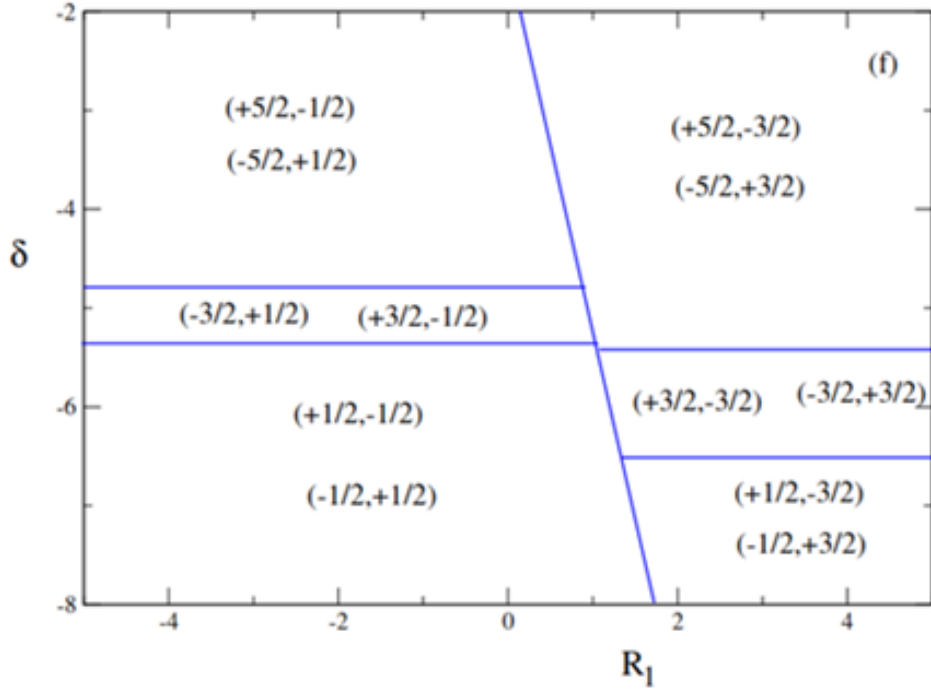


Figure III. 2: Diagrammes de phase de l'état fondamental d'une structure borophene 'core-shell' dans les plans : (h, δ) pour $R_1 = 1$ et $R_2 = -1$ (a), (h, R_1) pour $R_2 = -1$ et $\delta = 0$ (b), (h, R_2) pour $R_1 = 1$ et $\delta = 0$ (c), (R_1, R_2) pour $h = 0$ et $\delta = 0$ (d), (δ, R_2) pour $R_1 = 1$ et $h = 0$ (e), et (δ, R_1) pour $R_2 = 1$ et $h = 0$ (f).

III.3.2 Résultats des simulations par la méthode Monte Carlo

Tout au long de cette partie de mémoire, nous avons appliqués les simulations de Monte Carlo (MCS) pour étudier les propriétés magnétiques de la structure borophene 'core-shell'. Nous avons appliqué les conditions aux limites libres. De plus, Pour chaque configuration de départ, 10^5 étapes de Monte Carlo sont effectuées. À chaque étape des MCS, tous les sites du système sont balayés et des retournements de spins sont effectués. Les flips sont acceptés ou rejetés selon une probabilité basée sur la statistique de Boltzmann. Avant d'atteindre l'équilibre, nous écartons les 10^4 premières étapes de Monte Carlo, en partant de différentes configurations initiales.

Les aimantations partielles de chaque site sont données par :

$$M_S = \frac{1}{N_S} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \quad (\text{III.2})$$

$$M_\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \left\langle \sum_j \sigma_j \right\rangle \quad (\text{III.3})$$

L'aimantation totale du système est donnée par :

$$m_{tot} = \frac{N_S M_S + N_\sigma M_\sigma}{N_S + N_\sigma} \quad (\text{III.4})$$

L'énergie totale du système par site est :

$$E = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} \quad (\text{III.5})$$

Les susceptibilités magnétiques pour chaque spin du système sont données par :

$$\chi_S = \beta \left(\langle M_S^2 \rangle - \langle M_S \rangle^2 \right) \quad (\text{III.6})$$

$$\chi_\sigma = \beta \left(\langle M_\sigma^2 \rangle - \langle M_\sigma \rangle^2 \right) \quad (\text{III.7})$$

Avec: $\beta = \frac{1}{K_B T}$, ou K_B est la constant de Boltzmann qui prend une valeur unitaire. T est la température absolue.

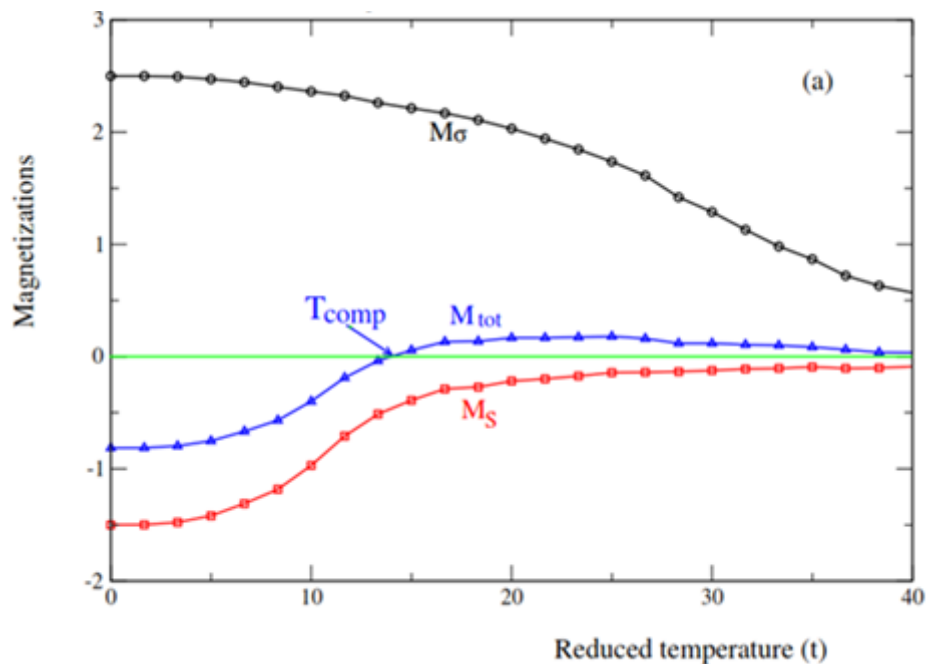
La susceptibilité magnétique totale pour chaque spin du système est :

$$\chi_{tot} = \frac{N_S \chi_S + N_\sigma \chi_\sigma}{N_S + N_\sigma} \quad (\text{III.8})$$

III.3.2.1 Comportement thermique de l'aimantation et de la susceptibilité

Dans cette partie, nous examinerons le comportement thermique de l'aimantation et de la susceptibilité, ainsi que les effets de variation des autres paramètres physiques sur l'aimantation totale de la structure borophene 'core-shell'. Nous avons tracé sur les figure III.3a-3b, les résultats obtenus pour $R_1=1$, $R_2=-1$ et $h=1$. La figure III.3a donne la variation des aimantations partielles et totale en fonction de la température. Cette figure montre l'existence d'une température de compensation, $t_{\text{comp}} = 14,5$. En comparant nos résultats avec ceux de la littérature, un tel résultat est conforme à ceux mentionnés dans la référence [158].

La figure III.3b illustre le comportement thermique des susceptibilités pour les mêmes valeurs fixes des paramètres de la figure III.3a. On constate que le premier maximum de la susceptibilité magnétique totale et celui de la susceptibilité partielle dans la coquille correspondent aux points d'inflexion de celles-ci correspondant aux températures de compensation et de transition, respectivement. Ces pics sont localisés à environ $t \approx 14,5$, tandis que le deuxième pic de susceptibilité totale et celui de la susceptibilité partielle du noyau correspondant aux températures de transition sont localisés à $t \approx 29,8$. En fait, la susceptibilité magnétique totale montre deux pics correspondant respectivement aux températures de compensation et de transition [159,161].



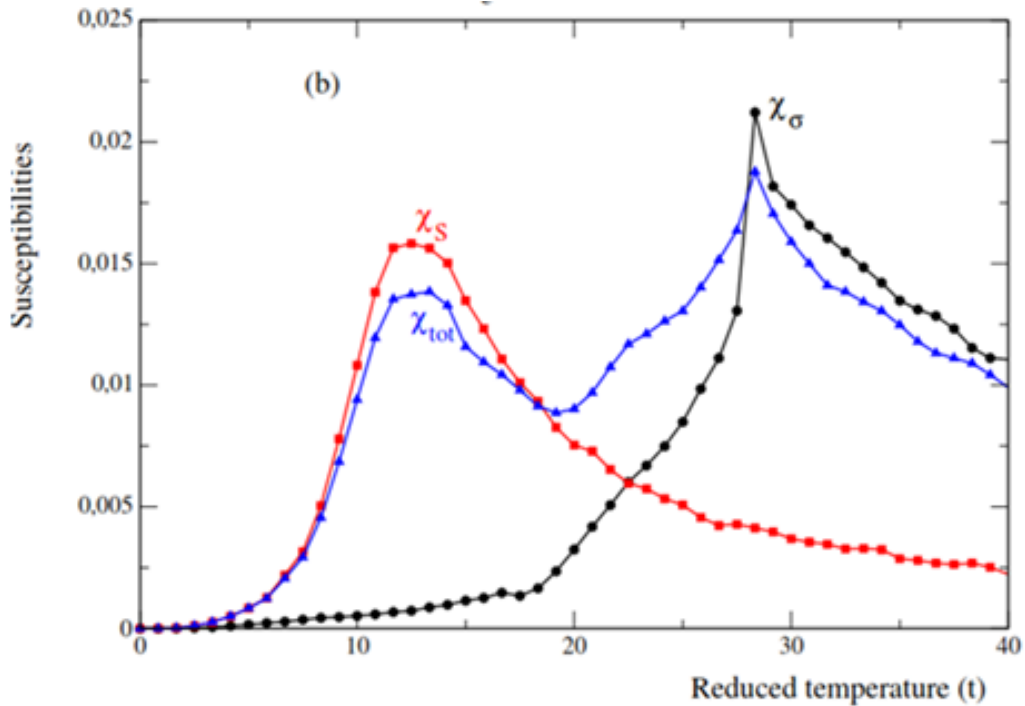


Figure III.3: (a) Magnétisations (b) susceptibilités en fonction de la température avec $R_1 = 1$, $R_2 = -1$, $h = 1$ et $\delta = 0$

III.3.2.2 Effet des couplages R_1 et R_2 sur les aimantations et sur la température de compensation.

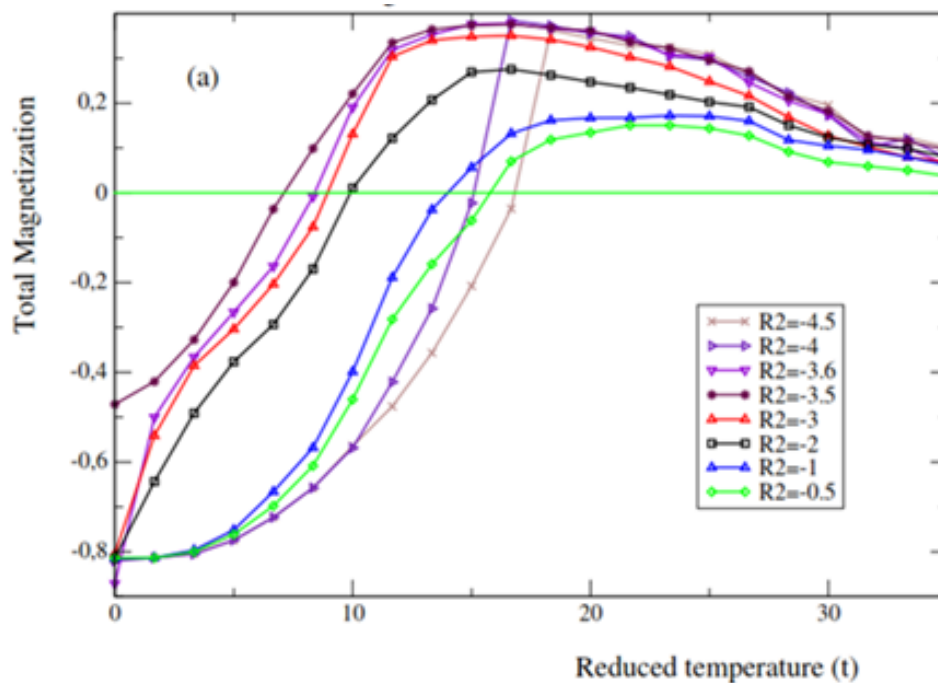
Afin d'étudier l'effet des couplages R_1 et R_2 sur la température de compensation, nous avons illustré sur la figure III.4a, le comportement de l'aimantation totale en fonction de la température réduite pour différentes valeurs du coefficient d'échange réduit R_2 , en l'absence du champ cristallin et pour un champ magnétique externe réduit $h = 1$. Cette figure montre une diminution de la température de compensation lorsque l'on augmente l'interaction de couplage d'échange réduit $|R_2|$ en valeur absolue jusqu'à $|R_2|=3.5$, puis augmente. Cela est dû à la compétition entre l'interaction anti-ferrimagnétique $|R_2|$ entre le noyau et la coquille et celle au sein de la coquille (R_1).

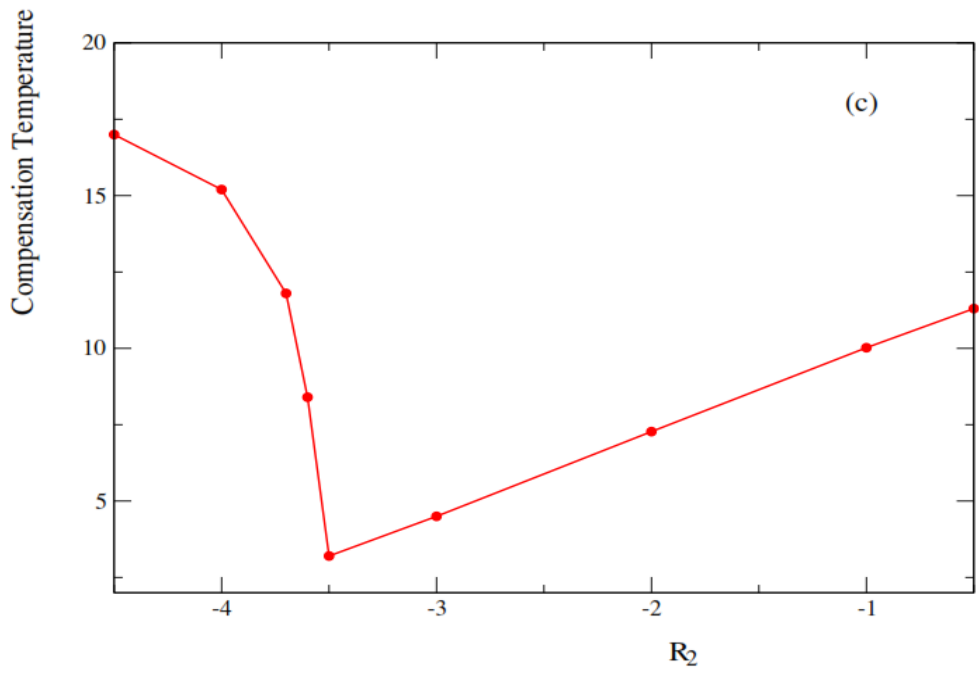
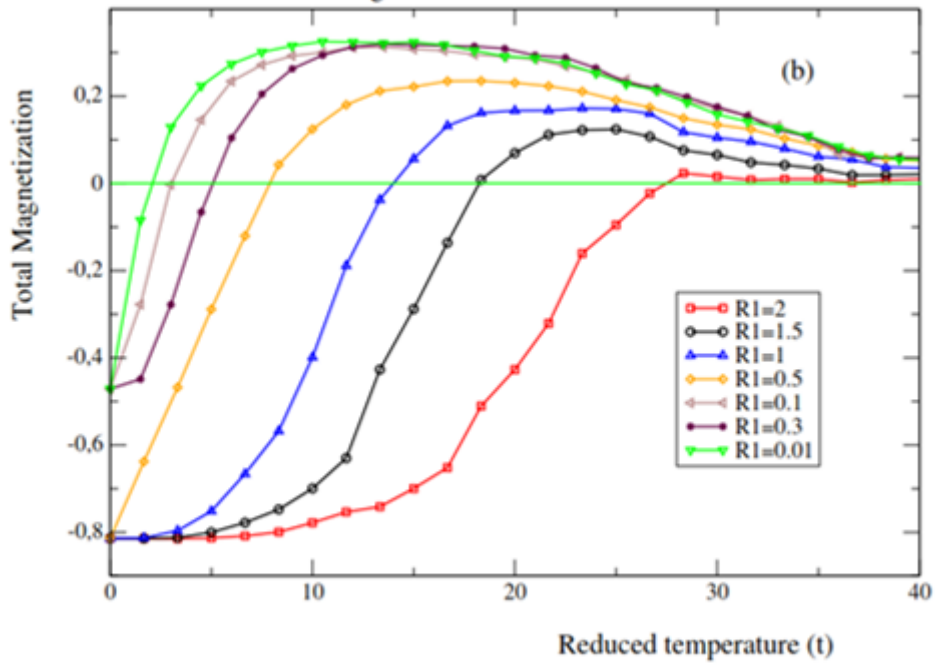
La figure III.4b, illustre le comportement de l'aimantation totale en fonction de la température réduite pour différentes valeurs du coefficient d'échange réduit R_1 . Dans ce cas, la température de compensation augmente lorsqu'on augmente le coefficient R_1 . Ce résultat est dû au fait que le nombre d'atomes dans la partie coquille est très important comparé au

nombre d'atomes dans le noyau. Par conséquent, augmenter le couplage au niveau de la coquille nécessite une température élevée pour trouver la phase super-paramagnétique du système [162].

En se basant sur les résultats de la figure III.4a, nous avons tracé sur la figure 4c, le comportement de la température de compensation en fonction de R_2 . Cette figure présente un comportement remarquable nommé la 'réentrance'. Cela signifie que pour une valeur fixe de température t_{comp} , les valeurs croissantes des interactions de couplage d'échange anti-ferrimagnétique R_2 conduisent à la transition du système de la phase d'ordre au désordre et vice versa.

A partir de la figure III.4b, nous reportons sur la figure III.4d, le comportement de la température de compensation en fonction du couplage d'échange réduit R_1 . Nous pouvons clairement constater qu'il y a une augmentation presque linéaire de t_{comp} lors de l'augmentation de R_1 . Cela est dû au comportement ferromagnétique entre les atomes appartenant à la coquille dominant dans le système.





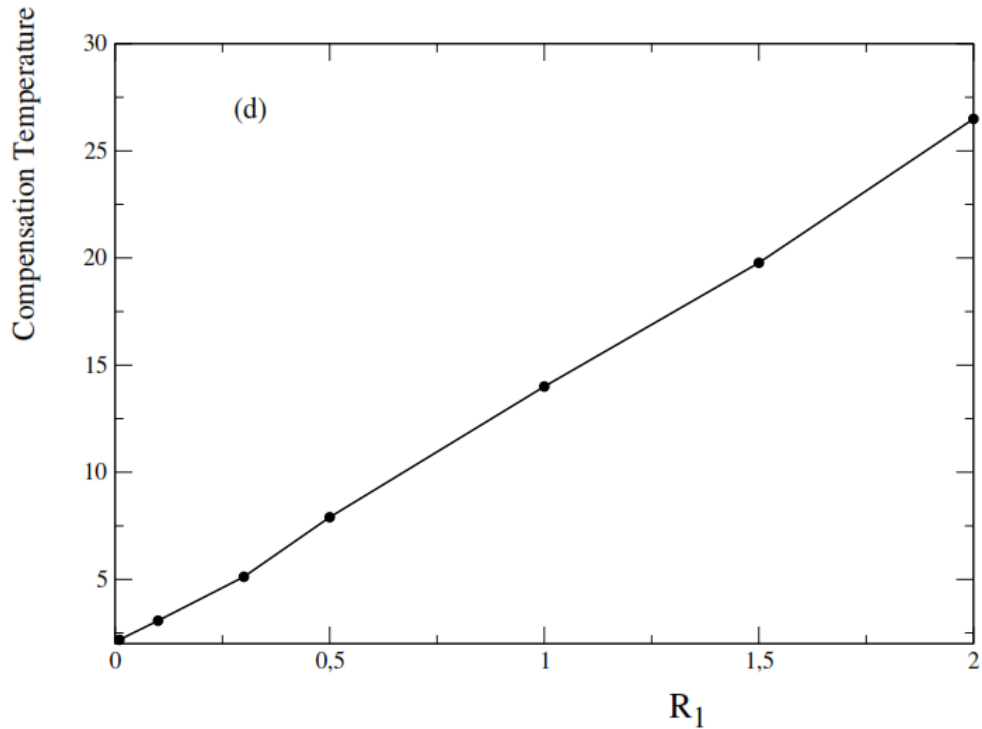


Figure III.4: (a) Aimantation totale en fonction de la température réduite pour différentes valeurs des interactions d'échange R_2 avec $R_1 = 1$ et (b) pour différentes valeurs des interactions d'échange R_1 avec $R_2 = -1$. (c) Températures de compensation en fonction de R_2 avec $R_1 = 1$ et (d) en fonction de R_1 avec $R_2 = -1$. Les champs magnétique externe $h = 1$ et cristallin $\delta = 0$.

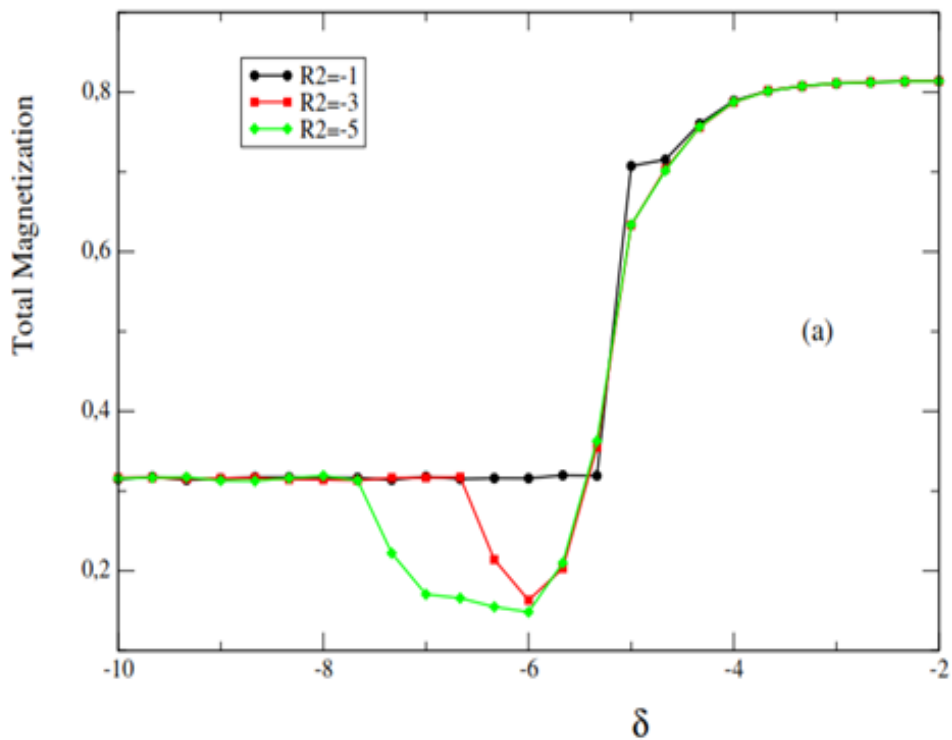
III.3.2.3. Effets du champ cristallin et des couplages R_1 et R_2 sur l'aimantation totale du système.

Dans ce paragraphe, nous étudions l'effet du champ cristallin réduit sur l'aimantation totale du système pour plusieurs valeurs des paramètres de couplage d'échange réduit R_1 et R_2 . En effet, nous représentons sur la figure III.5a la variation de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit pour des valeurs sélectionnées $R_2 = -1, -3$ et -5 . Sur cette figure, nous distinguons trois domaines, à savoir:

- $-10 < \delta < -9$, dans ce domaine, il n'y a pas d'effet de δ sur le comportement des aimantations. La valeur de l'aimantation totale n'est pas affectée par la variation du champ cristallin réduit.

- Pour $-9 < \delta < -5,3$, l'effet du champ cristallin consiste à réduire les aimantations totales lorsque $R_2 = -3$ et $R_2 = -5$ alors que pour $R_2 = -1$ l'aimantation totale demeure constante.
- Dans le cas où $-5,3 < \delta < -2$, l'aimantation présente une transition du premier ordre à $\delta \approx -5$ avant de tendre vers la saturation.

En outre, la figure III. 5b correspond à la variation de l'aimantation totale avec le champ cristallin réduit. Il ressort de cette figure qu'il y a une augmentation de l'aimantation totale quand R_1 augmente. Pour $R_1 = 0,5$, la phase paramagnétique persiste pour toutes les valeurs $\delta < -3$. Alors que pour $R_1 > 0,5$ la phase paramagnétique disparaît et l'aimantation totale subit une transition de premier ordre.



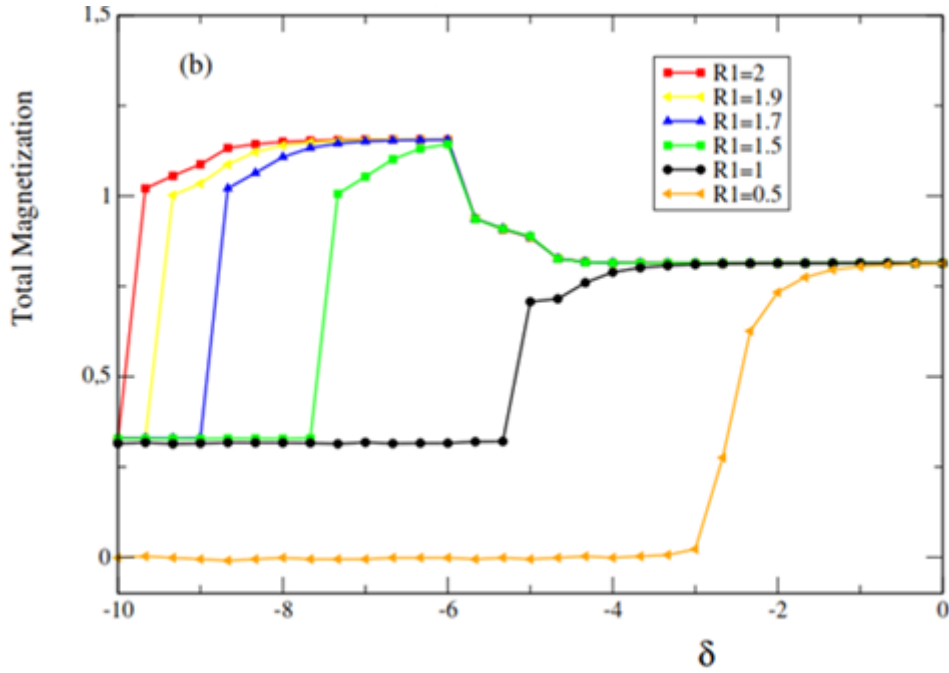


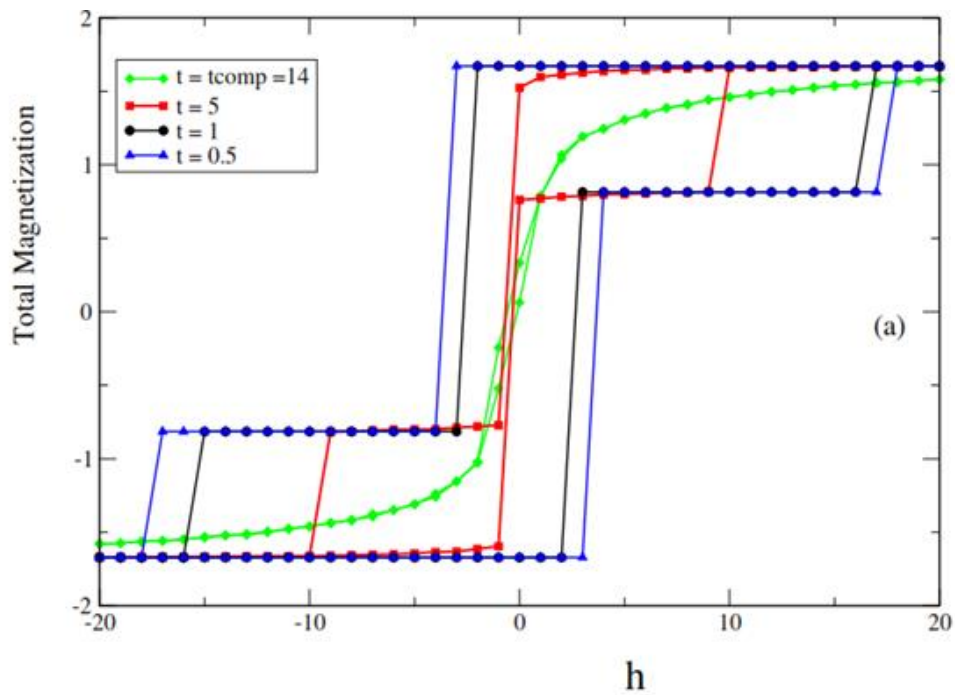
Figure III.5: Aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit (δ) pour $t = 1$ et $h = 0$.
(a) $R_1 = 1$. **(b)** $R_2 = -1$.

III.3.2.4 Détermination des cycles d'hystérésis

Afin d'explorer l'effet des différents paramètres physiques sur les cycles d'hystérésis de la structure du borophène type noyau-coquille, nous présentons sur les figures III.6a, III.6b et III.6c les résultats obtenus pour en l'absence du champ cristallin réduit ($\delta = 0$). En effet, la figure III.6a illustre nos résultats des aimantations totales pour différentes valeurs de température et pour des interactions de couplage d'échange réduites fixées $R_1 = 1$ et $R_2 = -1$. A partir de cette figure, On peut noter que l'accroissement de la valeur de température conduit à une diminution de la surface de la boucle. Ensuite, Pour la valeur $t = t_{\text{comp}} = 14$, la boucle se referme presque. Ce résultat peut s'expliquer par la compétition entre la température et h . En effet, le champ magnétique externe a tendance à aligner les spins tandis que l'effet de la température est de créer le désordre du système étudié. Ce comportement ressemble à celui obtenu dans la référence [163], pour la même structure de Borophène en utilisant la théorie du champ effectif avec corrélations.

Enfin, pour étudier l'effet des couplages réduits R_1 et R_2 sur les cycles d'hystérésis, nous présentons les résultats obtenus respectivement sur les figures III.6b et III.6c. Sur la figure

III.6b, $R_2 = -1$ et sur la figure III.6c, $R_1 = 1$, en l'absence du champ cristallin réduit. La figure III. 6b montre que l'augmentation de R_1 de 0,1 à 2 conduit à une augmentation des surfaces des boucles. En outre, la figure III.6c montre un effet opposé à celui obtenu précédemment, i.e. une augmentation des valeurs de $|R_2|$ conduit à une diminution des surfaces des boucles. Un tel résultat peut être interpréter par le fait que les valeurs croissantes des interactions de couplage d'échange ferromagnétique dans la coquille maintient le système dans son état ordonné, tandis qu'une augmentation du couplage anti-ferrimagnétique $|R_2|$ facilite le passage du système de la phase ordonnée à celle désordonnée (phase paramagnétique).



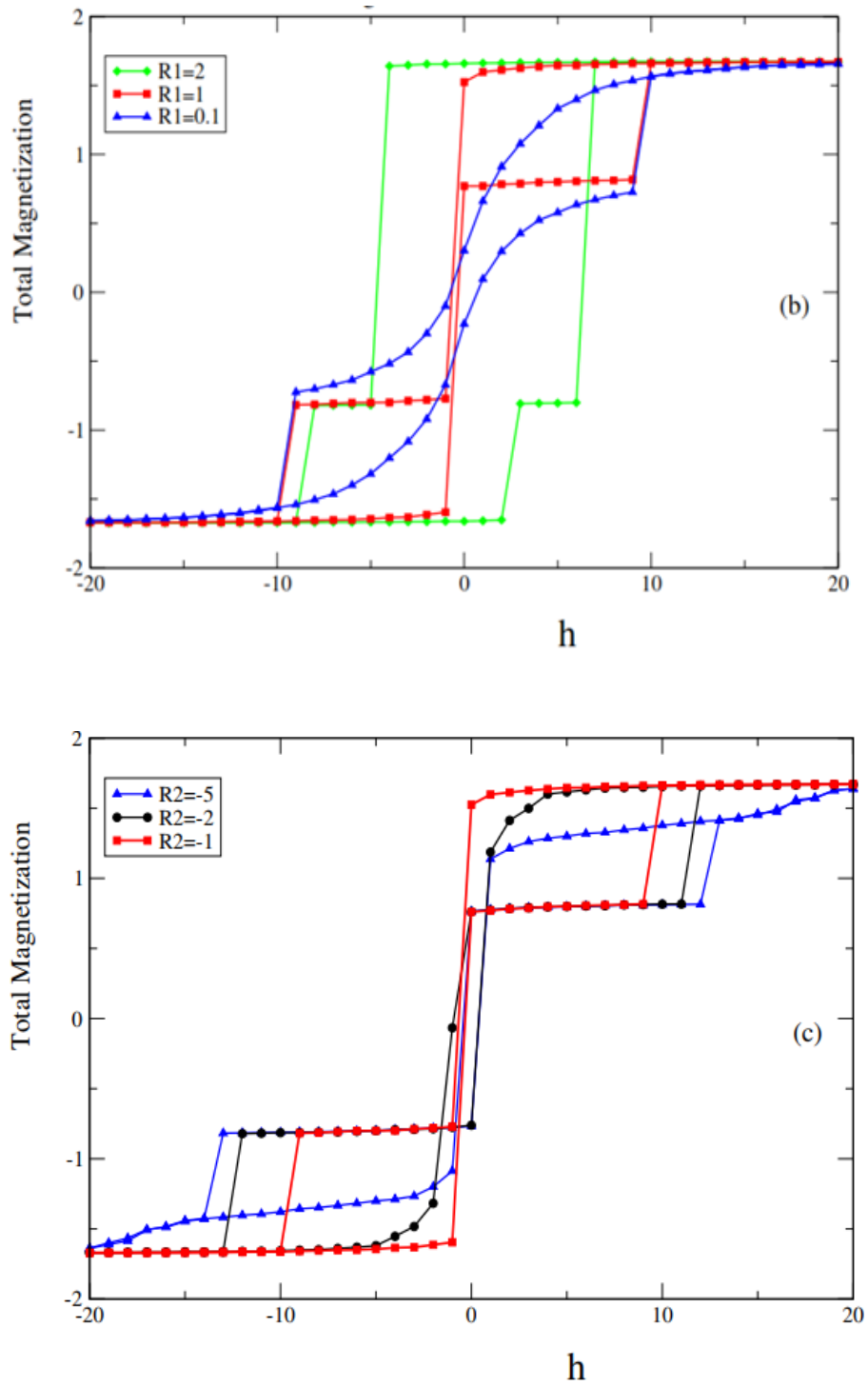


Figure III.6: Boucles d'hystérésis pour $\delta = 0$. (a) $R_1 = 1$ et $R_2 = -1$. (b) $t = 5$ et $R_2 = -1$. (c) $t = 5$ et $R_1 = 1$.

III.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé des simulations de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis pour étudier les propriétés magnétiques d'une structure de type borophene noyau coquille constituée respectivement des spins $\sigma=5/2$ et $S=5/2$. Dans un premier temps, nous avons établi les diagrammes de phase de l'état fondamental dans différents plans. Une symétrie parfaite par rapport à l'axe $h = 0$ a été trouvée dans les deux plans (h, R_1) et (h, R_2) .

En outre, la variation thermique de l'aimantation totale et de la susceptibilité magnétique pour différentes valeurs des interactions de couplage d'échange, du champ magnétique externe et du champ cristallin sont étudiés. Les comportements de la température de compensation en fonction des coefficients d'échange réduits R_1 et R_2 ont été investigués.

Enfin, les cycles d'hystérésis du système étudié sont illustrés et discutés pour des valeurs fixes de différents paramètres physiques, notamment la température et les coefficients de couplage R_1 et R_2 .

CHAPITRE IV :
COMPORTEMENTS DES PROPRIETES THERMIQUES ET MAGNETIQUES
D'UNE STRUCTURE EN ALLIAGE BINAIRE DE BOROPHENE : ETUDE PAR LA
METHODE DE MONTE CARLO

IV.1 Introduction

Les matériaux en graphène ont été généralement examinés pour leurs propriétés qui sont profondément nécessaires dans diverses applications [164, 170]. Après la découverte du borophene, matériau flexible, les chercheurs l'ont consolidé en nanomatériau et en nanotechnologies avec des applications potentielles pour des gadgets ingénieux et d'autres appareils dans de nombreux domaines. Généralement, les matériaux 2D ont des propriétés physiques remarquables qui conviennent parfaitement aux appareils électroniques. De plus, leurs applications modernes concernent le domaine de la photonique, de la conversion d'énergie et ont aussi un grand potentiel en spintronique [171,176].

Récemment, certains spécialistes qui travaillent sur la conductivité thermique du borophene ont confirmé la faible conductivité de ce matériau à cause de son anisotropie. En réalité, les propriétés thermiques du borophene sont plus faibles, par rapport à d'autres matériaux comparables, en raison de la diffusion provoquée par les phonons [177,180]. Particulièrement, les surfaces du borophene sont exceptionnellement distinctes de celles observables sur le graphène. En fait, le borophene a des bords avec une morphologie qui évidemment dépend de la profondeur des liens entre les molécules de bore. De telles caractéristiques structurelles font du borophene une substance polymorphe et anisotrope [181,183].

Dans le présent chapitre nous étudions les propriétés magnétiques et thermiques d'un alliage binaire du borophene à spins mixtes utilisant les Simulations de Monte Carlo. Les alliages binaires considérés dans ce travail se composent de deux éléments de spins différents. Par ailleurs, ce type d'alliage dépend de la concentration des différents spins et de leurs substitutions dans la même structure de borophene. En général, l'alliage binaire a une concentration critique et limitée et les plus reconnus sont les alliages métalliques [184, 187].

Dans cette étude, nous utilisons les simulations de Monte Carlo pour établir les aimantations totales et partielles d'une structure d'alliage binaire de borophene de la forme A_pB_{1-p} . En outre, les températures de transition et de compensation réduites sont déduites. Enfin, l'aimantation totale en fonction des paramètres d'interactions dus aux couplages d'échange, du champ cristallin ainsi que les cycles d'hystérésis sont déterminés. Par ailleurs, notre travail vise en particulier à explorer l'impact de la concentration p des atomes A sur les propriétés magnétiques de la structure borophene.

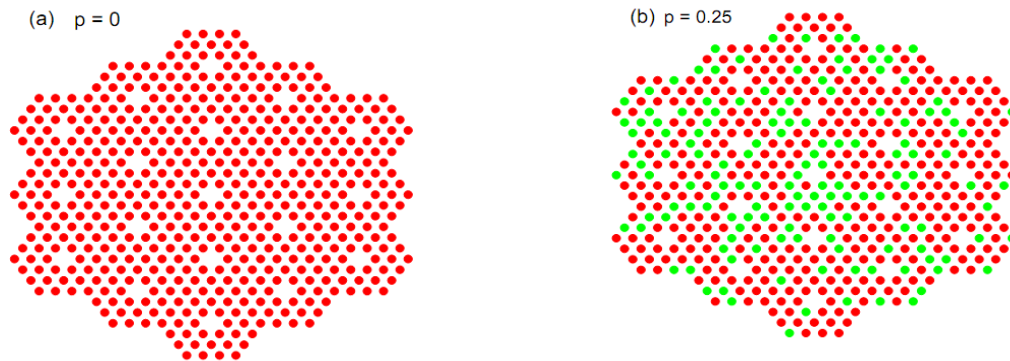
Le papier est organisé comme suit : dans la section II, nous exposons la théorie et le modèle de l'alliage binaire A_pB_{1-p} de la structure borophene. Dans la section III, nous discuterons les résultats obtenus par la méthode de Monte Carlo. Une conclusion est présentée à la fin de ce chapitre.

IV.2 Théorie et description du modèle

Notre modèle consiste en un alliage binaire qui se compose d'atomes A de spin $S=5/2$ avec une concentration p et d'atomes B de spin $\sigma=2$ avec une concentration $1-p$, comme schématisé sur la figure V.1. Dans ce système, chaque atome peut être lié aux atomes voisins adjacents avec les couplages d'échange suivants : J_{SS} , $J_{\sigma\sigma}$ et / ou $J_{\sigma S}$ (J_{SS} entre les atomes de spins S , $J_{\sigma\sigma}$ entre les atomes de spins σ et $J_{\sigma S}$ entre les atomes de spins σ et ceux de spins S). L'Hamiltonien \mathcal{H} dans le cadre du modèle de Blume-Capel, inclut l'interaction entre les premiers proches voisins, le champ externe H et les champs cristallins D_S et D_σ et est donné comme suit :

$$\mathcal{H} = -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i S_i \varepsilon_j S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} \delta_k \sigma_k \delta_l \sigma_l - J_{\sigma S} \sum_{\langle k,j \rangle} \delta_k \sigma_k \varepsilon_j S_j - H \left(\sum_i \varepsilon_i S_i + \sum_k \delta_k \sigma_k \right) - D_S \sum_j \varepsilon_j^2 S_j^2 - D_\sigma \sum_k \delta_k^2 \sigma_k^2 \quad (\text{IV.1})$$

Où $\langle i, j \rangle$ représente les premiers sites voisins (i et j). ε_i prend 1 si le site i est occupé par le spin S et 0 sinon. δ_i prend 1 si le site i est occupé par le spin σ et 0 sinon.



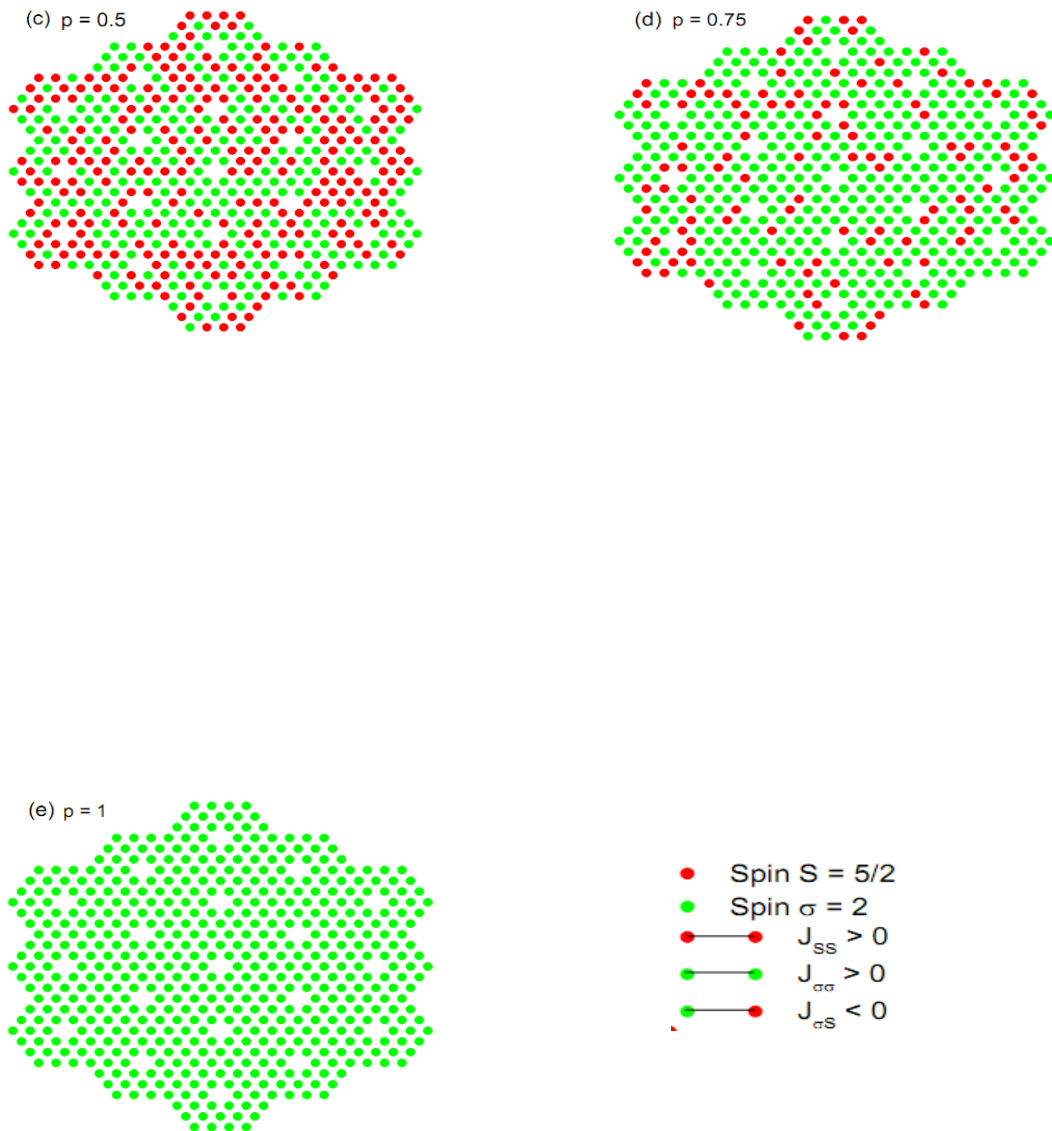


Figure IV.1: Représentation schématique d'un alliage binaire A_pB_{1-p} de la structure borophene.

Dans ce chapitre, le coefficient d'interaction entre les atomes de spins différents $J_{\sigma S}$ est supposé anti-ferrimagnétique. Ce choix conduit à l'apparition de la phase superparamagnétique caractérisée par une température de compensation. Le système implique le

nombre total de spins $N = N_S + N_\sigma$ spins, avec $N_S = (1-p)N$ et $N_\sigma = pN$. Dans nos simulations, nous procédons à générer différentes configurations en balayant le système étudié séquentiellement par retournements de spins. Selon les exigences de l'utilisation de l'algorithme Metropolis, les flips sont soit acceptés, soit rejetés.

Les aimantations partielles en alliage binaire A_pB_{1-p} par site sont :

$$M_S = \frac{1}{N_S} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \quad (\text{IV.2})$$

$$M_\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \left\langle \sum_k \sigma_k \right\rangle \quad (\text{IV.3})$$

L'aimantation totale dans les composés binaires A_pB_{1-p} est donnée par :

$$M_{tot} = \frac{N_S M_S + N_\sigma M_\sigma}{N_S + N_\sigma} \quad (\text{IV.4})$$

IV.3 Résultats et discussions des simulations Monte Carlo

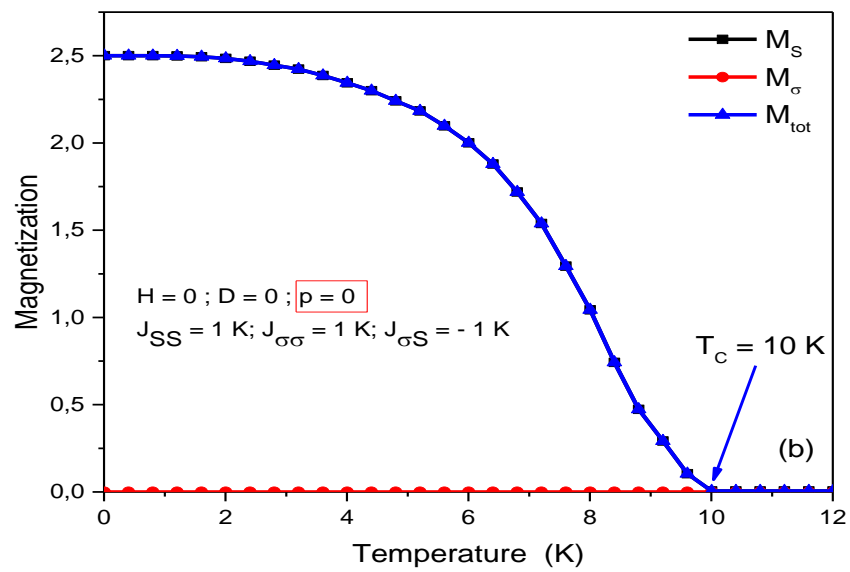
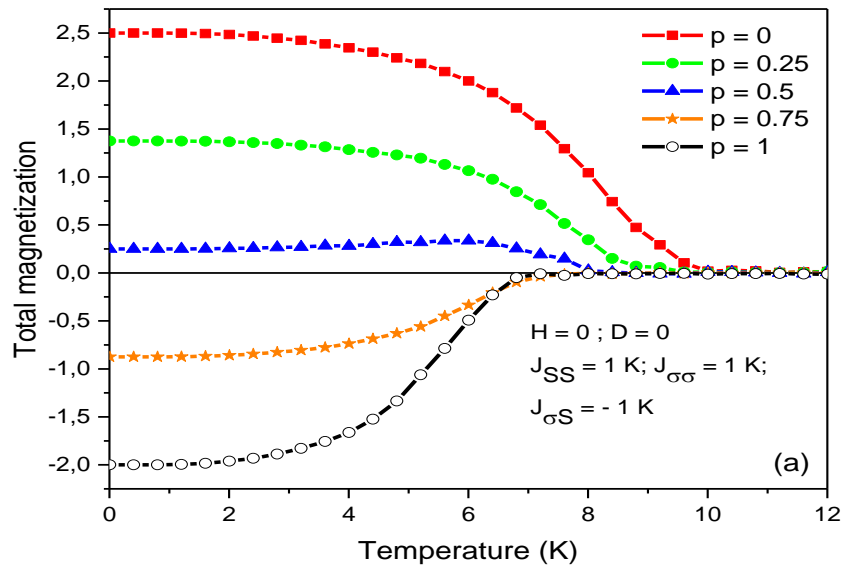
Dans cette section, grâce à la méthode standard de Monte Carlo, nous discuterons les résultats obtenus d'une structure d'alliage binaire de borophene. Les conditions aux limites libres sont adoptées pour des valeurs sélectionnées de la concentration p . La figure IV. 2a illustre le comportement thermique des aimantations totales pour plusieurs valeurs de la probabilité p de concentration des atomes A dans le système étudié. Cette figure est obtenue pour les couplages $J_{SS}=1.$, $J_{\sigma S}=-1$, $J_{\sigma\sigma}=1$ et en absence des champs magnétique externe ($H=0$) et cristallin ($D=0$). La valeur $p=0$ correspond au cas où le système est pur et est formé uniquement par les atomes de spin $S=5/2$. Par contre, $p=1$ correspond au cas où le système est aussi pur mais constitué uniquement des atomes de spin $\sigma=2$. Par ailleurs $0 < p < 1$ correspond aux cas intermédiaires d'alliage binaires. Sur la figure IV. 2a, nous constatons clairement que l'aimantation totale du système passe, à très basses températures, de la valeur $5/2$ pour $p=0$ à la valeur -2 pour $p=1$. En effet, la valeur de l'aimantation totale diminue, ceci est dû à la substitution des spins S par les spins σ . En outre, une telle diminution de l'aimantation est suivie par une diminution de la température critique du système. En effet, l'augmentation de p

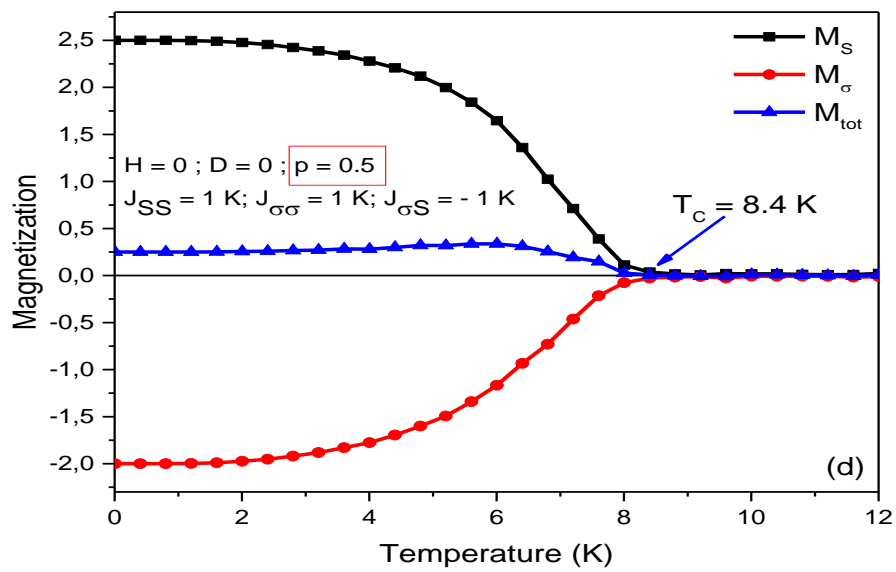
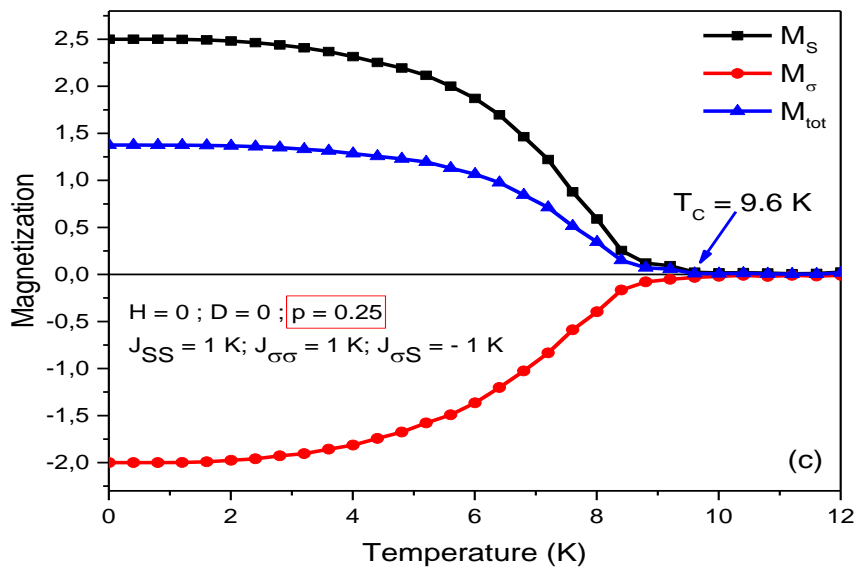
permet une diminution des spins $5/2$ et d'augmenter les spins 2 , ce qui favorise le passage du système étudié de la phase ordonnée à la phase paramagnétique pour des températures plus basses.

Pour suivre l'évolution des aimantations totales de l'alliage binaire, nous rapportons d'abord, sur la figure IV.2b, le cas où le système ne contient que les atomes de spins $S=5/2$ qui correspond au cas $p = 0$. La valeur de la température de transition, dans ce cas, est égale à $T=10$ K.

Pour voir l'effet de la concentration p , qui reflète le degré de concentration des spins dans l'alliage, sur le comportement des propriétés magnétiques, nous traçons la figure IV.2c. Cette figure décrit le comportement thermique des aimantations totales pour la valeur de concentration $p = 0,25$. Cela signifie que 25% des spins $S (\pm 5/2)$ ont été remplacés par des σ -spins (± 2). La valeur de l'aimantation totale aux basses températures correspond bien à 1.375 ($0.75 \times 5/2 - 0.25 \times 2 = 1.375$). Dans ce cas, la température de transition diminue et vaut $T_c=9,6$ K.

Ensuite, la figure IV.2d présente le cas où la valeur de la concentration p atteint 50% correspondant au cas d'équilibre entre les concentrations des deux spins S et σ . Cela signifie que le système contient le même nombre de spin S et σ répartis aléatoirement. Cette figure confirme que la température critique T_c continue de diminuer avec l'augmentation de la concentration des spins σ . Le même comportement est observé sur la figure IV.2e en augmentant davantage la concentration des spins σ ($p = 0,75$). Une telle figure montre que la valeur de la température de transition diminue pour atteindre $T_c = 7,6$ K. Enfin, sur la figure IV.2f, un comportement est exactement opposé de la figure IV.2b, la concentration est devenue $p = 1$. Cette figure correspond au cas pur où le système étudié est formé par les spins σ uniquement. Dans ce cas, la température de transition continue à diminuer pour atteindre la valeur $T_c=7,2$ K. Par ailleurs, un travail similaire a été consacré aux propriétés des nanoparticules magnétiques d'alliage ternaire [188].





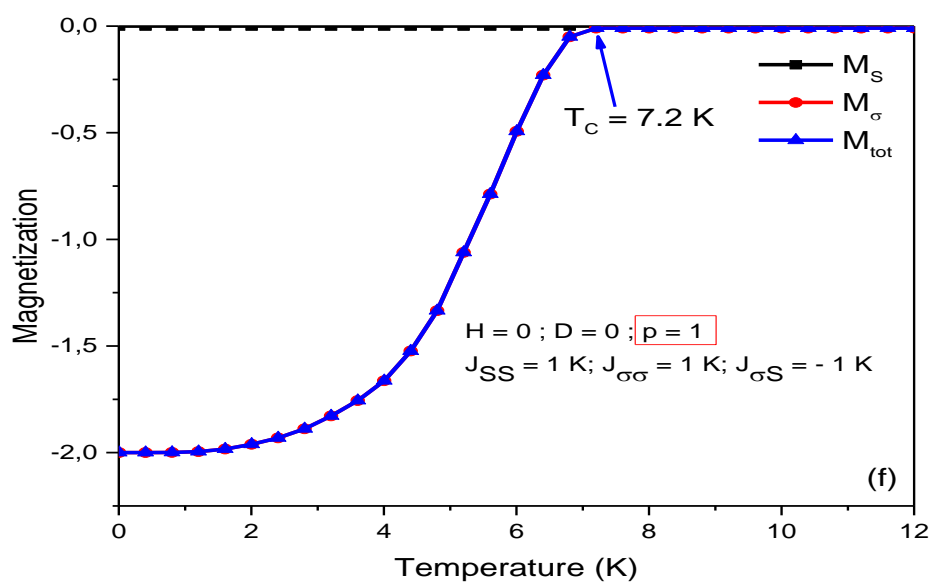
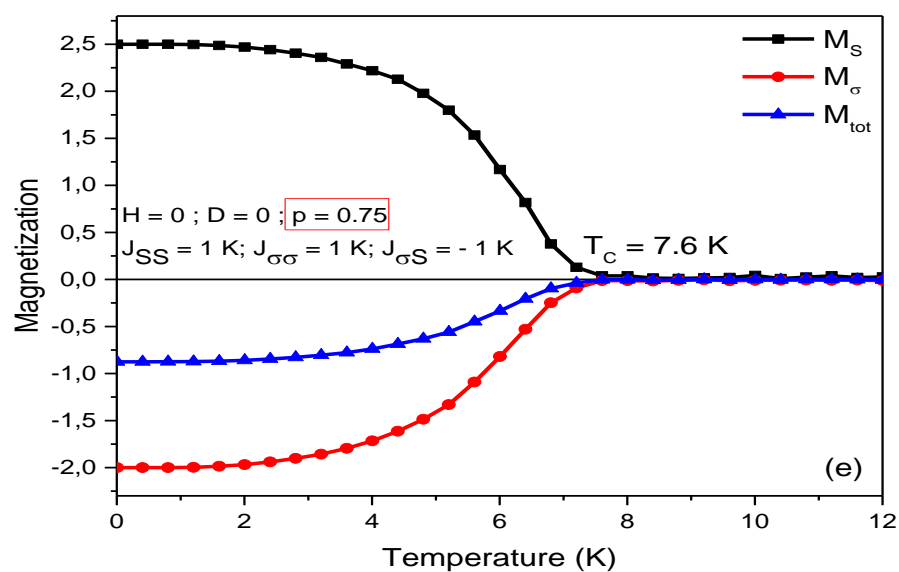
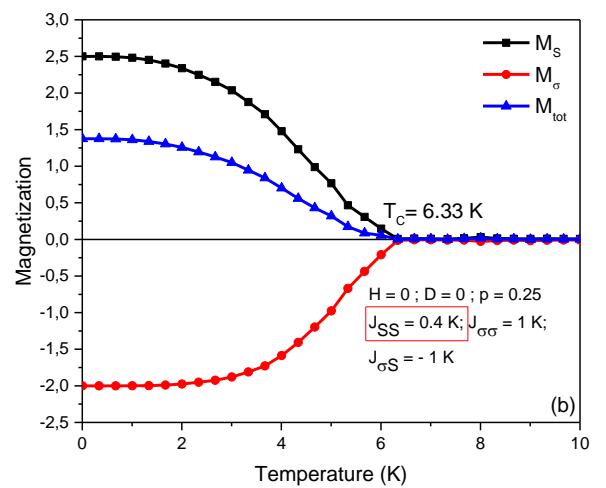
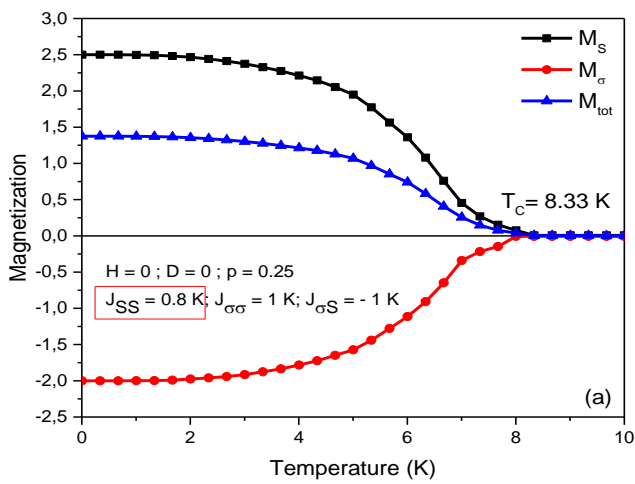


Figure IV.2: Comportement thermique des aimantations totales pour des valeurs de p allant de 0 à 1 (a). Dépendances thermiques de l'aimantation totale : (b) $p=0$, (c) $p = 0,25$, (d) $p = 0,50$, (e) $p = 0,75$ et (f) $p = 1$. $J_{SS}=1.$, $J_{\sigma S}=-1$, $J_{\sigma\sigma}=1$ K, $H=0$, et $D=0$.

Dans cette partie, nous fixons la valeur de la concentration des spins σ à $p = 0,25$. En fait, notre objectif est d'explorer le comportement du système étudié lorsque nous faisons varier le couplage d'interaction J_{SS} . Pour cela, nous traçons les figures IV. 3 (a-c) pour $J_{\sigma S}=-1$, $J_{\sigma\sigma}=1$ K, $H = 0$ et $D = 0$ dans le cas où $p=0.25$. Nous commençons par la figure IV.3a obtenue pour $J_{SS}=0,8$. Sur cette figure, la température critique est de 8,33k. Par contre, la figure IV. 3b montre qu'une diminution du coefficient de couplage entre spins S ($J_{SS}=0.4$) réduit la température critique à 6,33K. Pour conclure, la figure IV.3c expose clairement l'évolution du comportement de l'aimantation totale et de la température critique en diminuant J_{SS} . Il est clair que la température critique diminue lorsque la valeur du paramètre de couplage J_{SS} diminue.



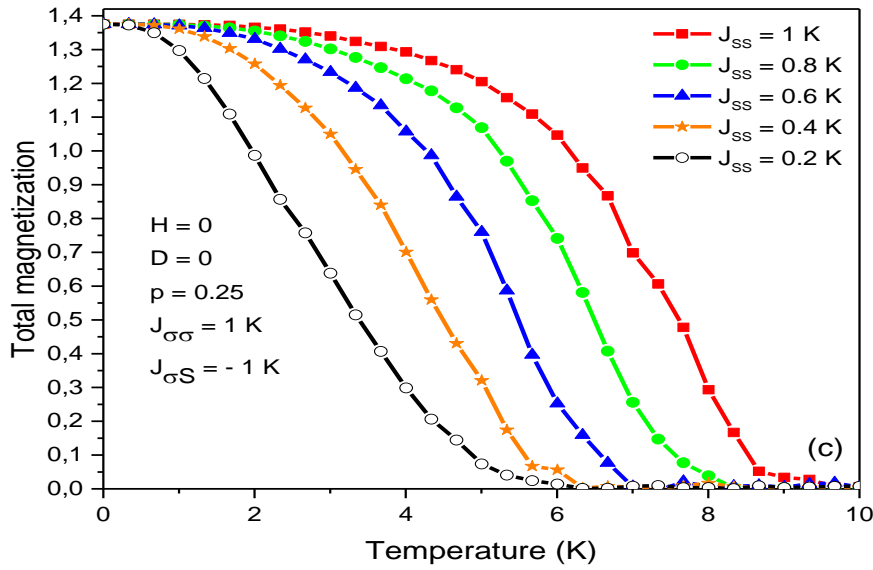


Figure IV.3: Comportement thermique des aimantations totales pour $p=0.25$, $J_{\sigma S}=-1$, $J_{\sigma\sigma}=1$, $H=0$, et $D=0$: (a) $J_{SS}=0.8$, (b) $J_{SS}=0.4$ et (c) $J_{SS}=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ et 1 .

Pour étudier le comportement des aimantations de l'alliage binaire A_pB_{1-p} considéré en variant l'interaction de couplage d'échange $J_{\sigma\sigma}$, nous traçons les Figures IV. 4a et 4b pour $J_{\sigma\sigma} = 2$ et $J_{\sigma\sigma} = 0,2$ (K), respectivement. Ces dernières sont représentés pour $p = 0,25$, $J_{SS} = 1$, $J_{\sigma S} = -1$, $H = 0$ et $D = 0$. On en déduit que la température critique diminue en abaissant les valeurs de l'interaction de couplage $J_{\sigma\sigma}$. En effet, la valeur de la température critique est d'environ $T_c = 9,67$ (K) sur la figure VI.4a ($J_{\sigma\sigma} = 2$), alors qu'elle est presque égale à $T_c = 8,67$ (K) sur la figure IV.4b ($J_{\sigma\sigma} = 0,2$). En effet, la diminution des coefficients de couplage aussi bien J_{SS} que $J_{\sigma\sigma}$, contribue à la diminution de la température critique car le système passe aisément (à basses températures) de la phase ordonnée (anti-ferrimagnétique) à la phase désordonnée (paramagnétique).

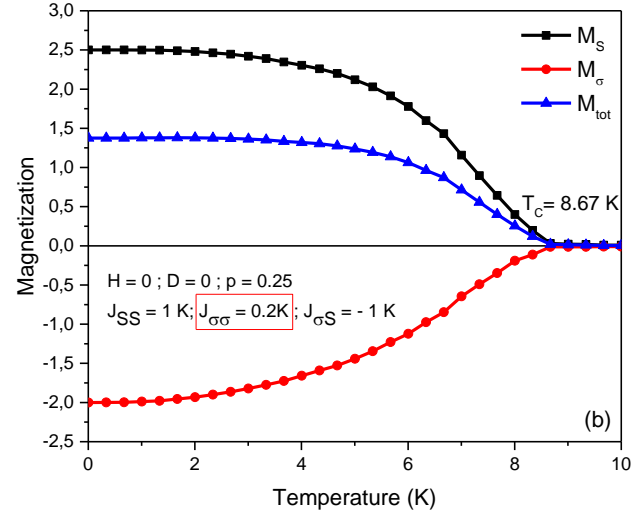
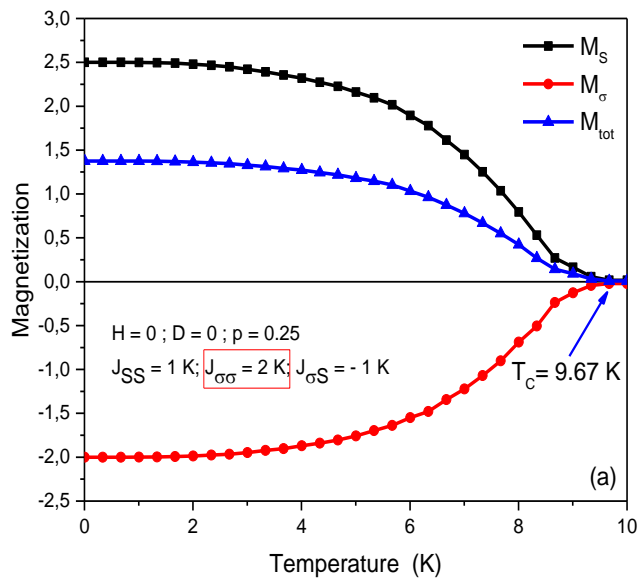


Figure IV.4 : Comportement thermique des aimantations totales pour $p=0.25$, $J_{\sigma S}=-1$, $J_{SS}=1$, $H=0$, $D=0$: (a) $J_{\sigma\sigma}=2$ and (b) $J_{\sigma\sigma}=0.2$.

Maintenant, notre but est d'explorer la température de compensation dans la structure de l'alliage binaire borophene. Pour cela, nous illustrons les Figures V.5a à 5d, pour $p = 0,35$, $J_{\sigma S} = -0,5$, $J_{\sigma\sigma} = 3$, $H = 0$, $D = 0$ et pour différentes valeurs de J_{SS} . En fait, la figure VI.5a est tracée pour $J_{SS} = 0,2$. Cette figure prouve l'apparition d'une température de compensation, correspondante à une phase super-paramagnétique pour des paramètres physiques bien choisis. Ensuite, à partir des figures IV.5b et IV.5c qui sont obtenues respectivement pour $J_{SS}=0,2$ et $J_{SS}=0,02$, nous remarquons une diminution de la température de compensation en diminuant les valeurs du paramètre de couplage J_{SS} . En outre, la Figure IV.5d regroupe les résultats trouvés sur les Figures IV.5a à IV.5c. En effet, la diminution du couplage d'échange entre spins contribue à l'apparition du désordre dans le système pour des faibles valeurs de température. Nous notons qu'une étude similaire a été réalisée pour explorer les propriétés magnétiques d'une nanoparticule sphérique en alliage binaire [189].

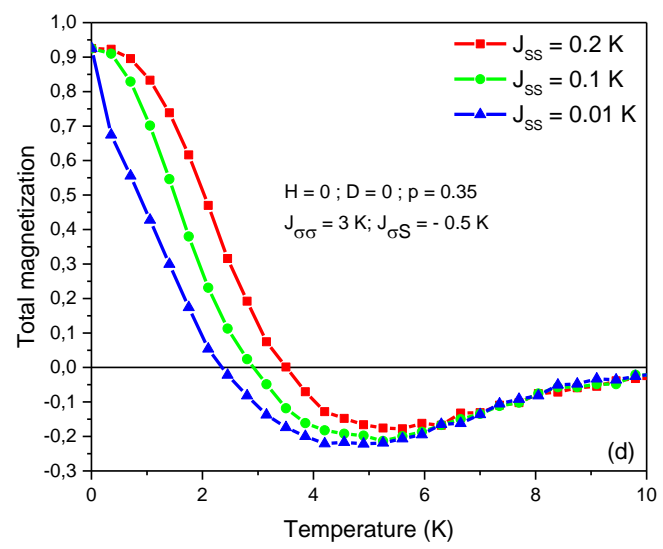
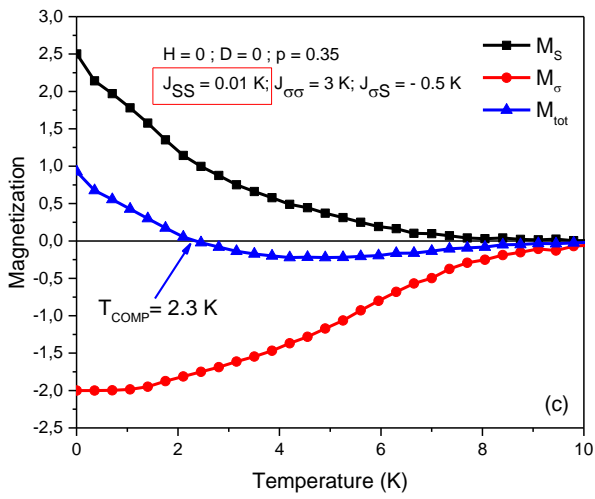
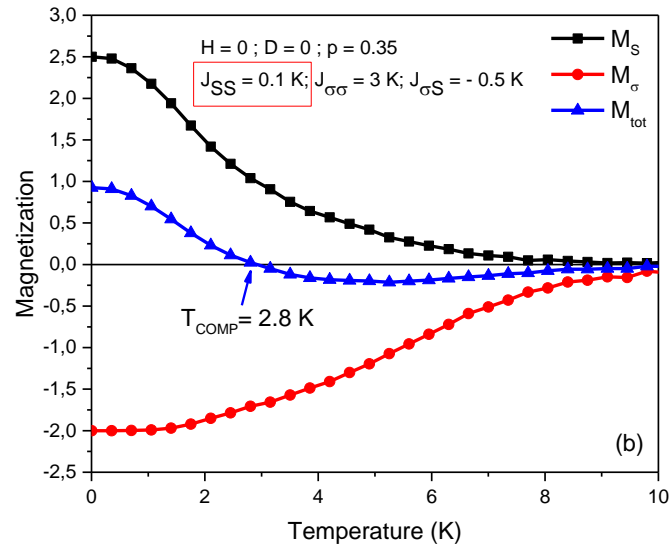
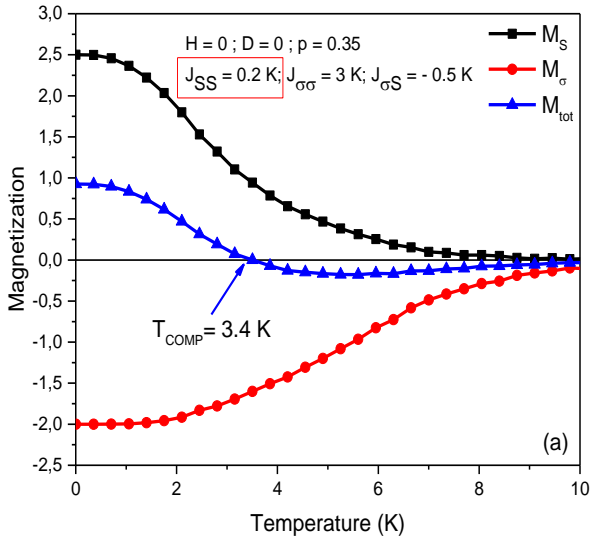
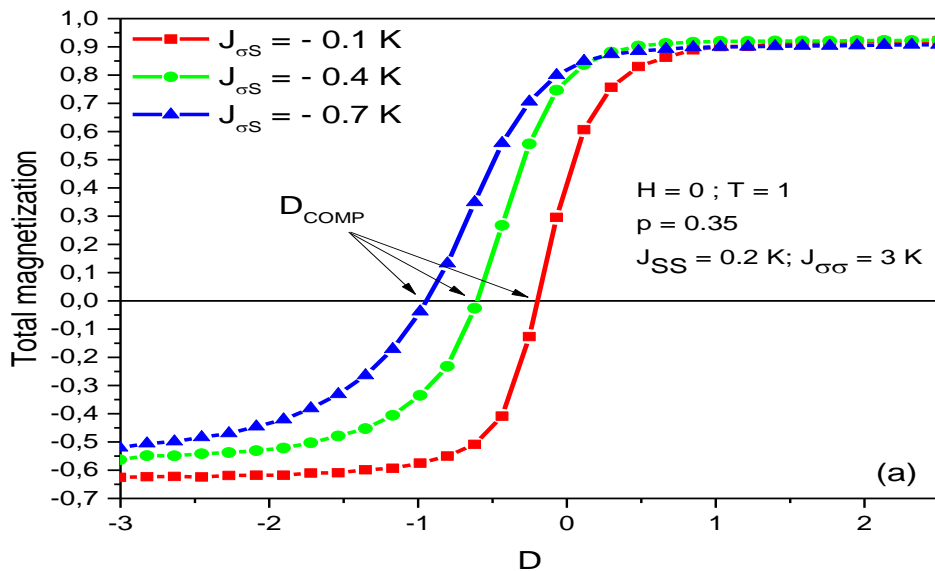


Figure IV.5 : Comportement thermique des aimantations totales pour $p=0.35$, $J_{\sigma S}=-0.5$, $J_{\sigma\sigma}=3$, $H=0$ et $D=0$: (a) $J_{SS}=0.2$, (b) $J_{SS}=0.1$, (c) $J_{SS}=0.01$ et (d) $J_{SS}=0.2$, 0.1 et 0.01.

IV.3.2 Variation du champ cristallin

Les figures IV.6a et IV.6b illustrent le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin D pour $T = 1$ (K), $J_{SS} = 0,2$ (K), $J_{\sigma\sigma} = 3$ (K) et $H = 0$. En fait, la figure IV. 6a illustre la variation de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin pour des valeurs sélectionnées de couplage anti-ferrimagnétique $J_{\sigma S}$. Il est clair que les aimantations totales du système subissent une transition du second ordre pour toutes les valeurs du paramètre $J_{\sigma S}$. En plus, pour $D \geq 1$, les aimantations totales convergent vers une valeur de saturation $M_{\text{sat}} \approx 0,92$ indépendamment de la valeur $J_{\sigma S}$. En outre, le point de compensation D_{comp} du champ cristallin diminue lors de l'augmentation de la valeur absolue du paramètre $J_{\sigma S}$. Par ailleurs, sur la figure VI.6b, notre objectif est d'étudier l'effet de la probabilité p de concentration de l'alliage sur le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin D . Le système subit également une transition de second ordre pour $-1 < D < 1$. Nous notons que le point de compensation D_{comp} du champ cristallin augmente avec l'augmentation de la valeur de la concentration p .



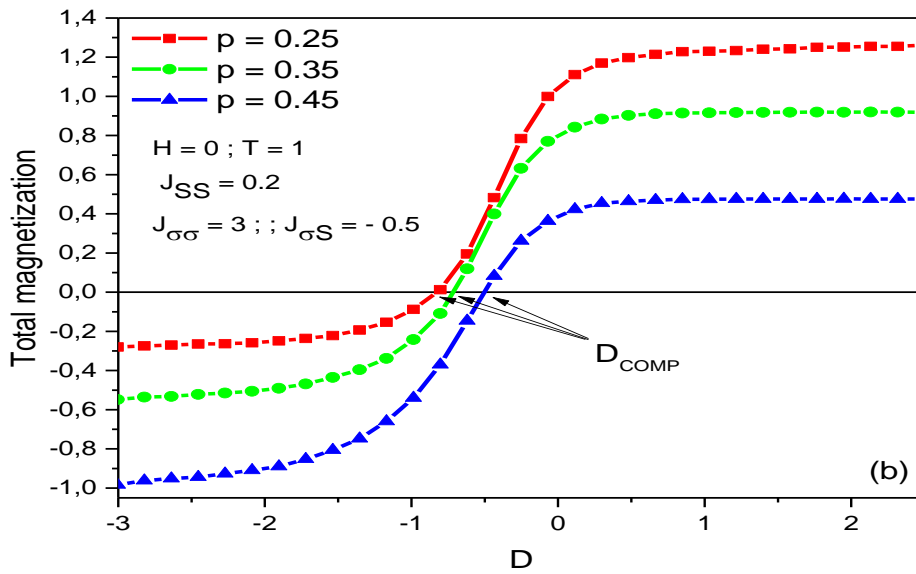
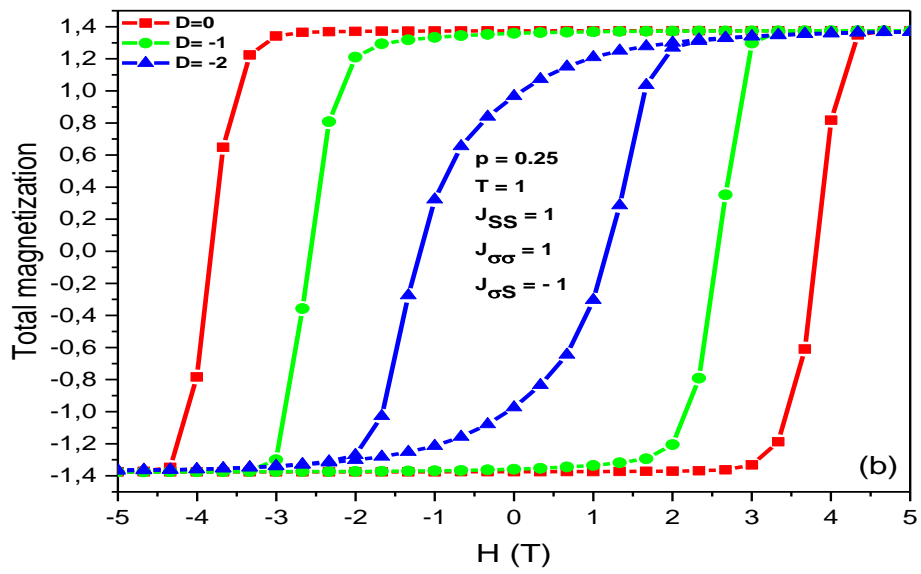
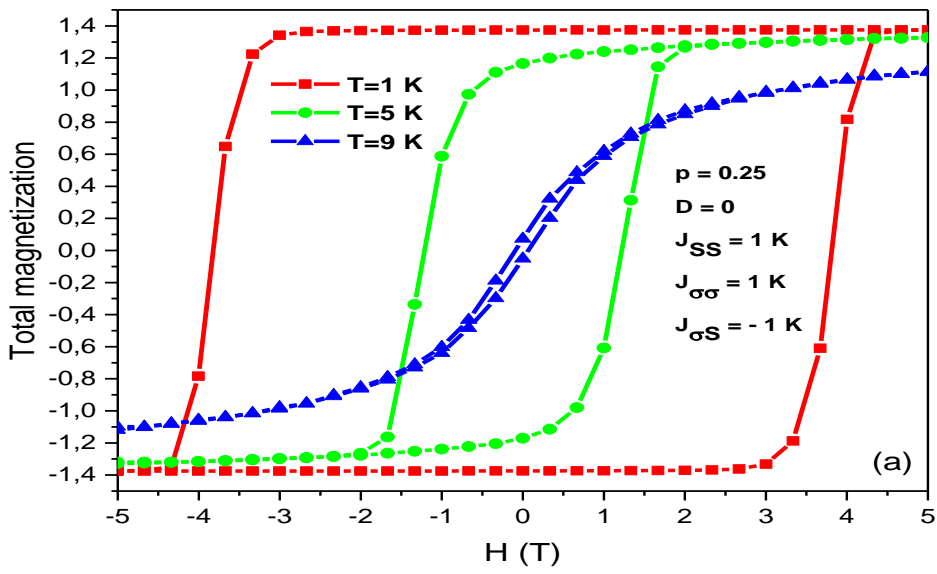


Figure IV.6: Variation de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin D , pour $T = 1$, $J_{SS} = 0,2$, $J_{\sigma\sigma} = 3$ et $H = 0$: **(a)** pour les valeurs sélectionnées de $J_{\sigma S}$. **(b)** pour des valeurs données de la concentration p .

VI.3.3 Détermination des Cycles d'Hystérésis

Dans le but d'étudier les cycles d'hystérésis, nous présentons les Figures IV.7a à IV.7d. La figure IV.7a montre que quand la température augmente, la surface des boucles du cycle diminue jusqu'à sa disparition pour la température critique $T_c \approx 9$ (K). En fait, l'augmentation de la température entraîne une diminution du champ coercitif. En outre, la Figure VI.7b illustre les cycles d'hystérésis du système étudié à $T=1K$, pour des valeurs fixes du champ cristallin D . En fait, une augmentation de la valeur du champ cristallin conduit également à une diminution de la surface des boucles. Par ailleurs, la figure IV. 7c illustre les cycles d'hystérésis pour des valeurs sélectionnées de l'interaction de couplage d'échange J_{SS} . Une telle figure montre que la surface des boucles et le champ magnétique coercitif augmentent avec l'augmentation du couplage d'échange J_{SS} , conformément à certains résultats trouvés précédemment [190].



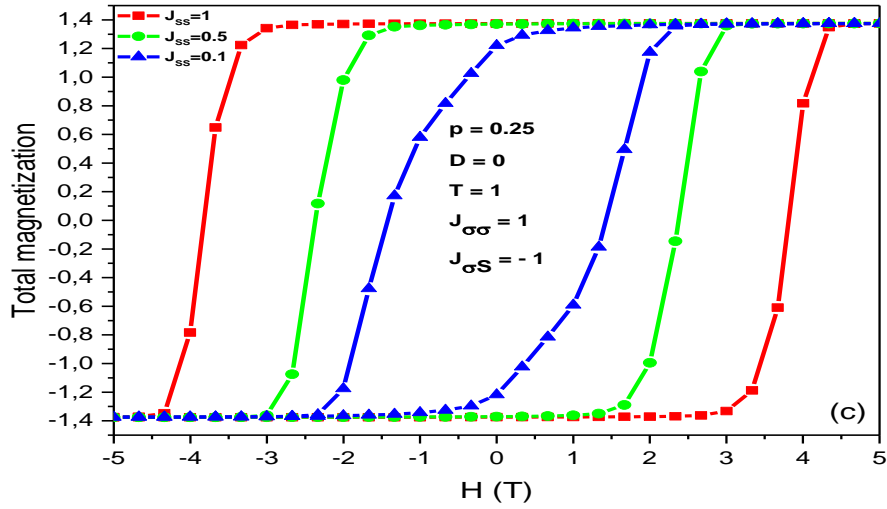


Figure IV.7: Cycles d'hystérésis du borophene en alliage binaire A_pB_{1-p} pour $p = 0,25$, $J_{\sigma\sigma}=1$ et $J_{S\sigma}=-1K$: (a) pour des valeurs sélectionnées de température et des valeurs fixes de $J_{SS} = 1$ et $D = 0$, (b) pour les valeurs sélectionnées de D et les valeurs fixes de $J_{SS} = 1$ K et $T = 1$ K, (c) pour les valeurs sélectionnées de J_{SS} et les valeurs fixes de $T = 1$ K et $D = 0$.

IV.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés magnétiques d'une structure d'alliage binaire de borophene de type A_pB_{1-p} . La concentration en atomes de spin $5/2$ est complémentaire à celle de spin 2 . L'Hamiltonien de l'alliage étudié comprend le couplage anti-ferrimagnétique qui lie les atomes A et B. Le comportement des aimantations totales est rapporté pour différentes valeurs de la concentration. Par ailleurs, pour des valeurs spécifiques des paramètres physiques et de la concentration, nous avons pu étudier la possibilité d'apparition de la compensation dans le système. De plus, les cycles d'hystérésis de la structure en question ont été établis et discutés. Il a été trouvé que la concentration et les interactions de couplage d'échange affectent fortement le comportement des aimantations totales de la structure.

CHAPITRE V :
PROPRIETES THERMIQUES ET MAGNETIQUES D'UNE STRUCTURE
NANOTUBE CORE-SHELL ANTI-FERRIMAGNETIQUE : ETUDE PAR LA
METHODE MONTE CARLO

V.1 Introduction

Les nanotubes magnétiques présentent un grand intérêt pour les chercheurs en raison de leurs propriétés intrinsèques spéciales et de leurs caractéristiques tridimensionnelles [191]. Les nanotubes de carbone (NTC), comme les structures des fullerènes, constituent l'un des allotropies du carbone [192,193]. Les nanotubes de carbone ont été découverts en 1991, par Sumio Iijima [194] comme un produit secondaire mineur dans la synthèse des fullerènes. Des trois formes allotropiques de carbone (graphite, diamant et fullerène), le graphite est l'élément le plus stable thermodynamiquement. Il est généralement constitué d'un empilement de feuilles de graphène liées par des liaisons de type Van der Waals et la feuille de graphène peut être vue comme une mono couche à deux dimensions (2D) de carbone hybride sp^2 organisés en cycles hexagonaux [195,198]. Quant au nanotube de carbone, il se présente sous la forme d'une feuille de graphène, décrivant une géométrie tubulaire. Ainsi, à partir de la structure 2D de la feuille de graphène, on obtient un nanotube de carbone avec une structure cylindrique unidimensionnelle (1D) [199,202]. Les nanotubes de carbone à simple paroi (SWCNT) ont des diamètres allant de 0,4 à 6 nm. Par contre, dans les multi-parois (MWCNT) composé de nombreux nanotubes denses, l'espace entre chaque feuille est de 0,34 nm, de sorte que ses diamètres peuvent dépasser plusieurs dizaines de nanomètres [203, 208]. En fait, il est bien reconnu que la structure noyau-coquille se compose d'une partie principale (noyau) et d'une couche de recouvrement (coquille). Cette composition a généralement des propriétés différentes de celles du matériau à un seul composant [209,211]. En fait, une grande attention a été consacrée à l'étude des systèmes noyau-coquille dans de nombreux articles récents, tous en utilisant la technique de Monte Carlo. Kerouad et al. [212] ont étudié les propriétés magnétiques d'un nano fil d'Ising à spin mixte avec une morphologie de noyau interne. De plus, les propriétés magnétiques et thermiques d'une structure de borophene noyau-coquille ont été étudiées par les simulations Monte Carlo (SMC) [213]. D'autre part, Canko et al. [214] ont étudié la dépendance au champ cristallin des propriétés magnétiques d'un nanotube mixte de spins $1/2$ et 1 . Certains phénomènes caractéristiques sont établis comme les points tri-critiques. En appliquant les SMC, d'autres auteurs ont étudié les propriétés magnétiques et thermodynamiques. Des résultats pertinents ont été trouvés tels que la compensation et les températures de blocage dans de tels systèmes et montrant l'effet de plusieurs paramètres physiques sur de multiples boucles d'hystérésis [215, 219].

Dans cette partie de la thèse, nous étudions un système composé d'un nanotube magnétique de structure type noyau-coquille, avec des spins mixtes $\sigma=1$ (dans le noyau) et $S=3/2$ (dans la coquille). Le but ici est d'étudier les propriétés magnétiques à l'aide des simulations Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis. En particulier, nous examinons les effets des couplages qui lient les atomes du noyau entre eux, ceux du noyau avec ceux de la coquille et les atomes de la coquille entre eux ainsi que le champ cristallin sur les aimantations, les susceptibilités et sur le comportement de la température de blocage.

V.2 Hamiltonien et description du système

Le système étudié est une structure de type noyau-coquille de nanotubes dans le cadre des conditions aux limites libres. Notre modèle est formé par les spins $\sigma=1$ (dans le noyau) et $S=3/2$ (dans la coque). Le nombre total de spins du système est $N=N_\sigma+N_S=128$ avec $N_\sigma=64$ et $N_S=64$ (voir Figure V.1). Sur la figure V.1, chaque spin est lié aux spins voisins adjacents avec un couplage d'échange différent. En effet, l'interaction entre deux atomes voisins identiques (S-S) ou (C-C) est considérée comme ferromagnétique, tandis que l'interaction entre les deux atomes S et σ est considérée comme anti-ferrimagnétique.

L'Hamiltonien dans le modèle de Blume-Capel [220, 224] de notre système, avec des spins différents, inclut les interactions entre plus proches voisins, le champ magnétique externe H et le champ cristallin D . Ce système présente au niveau du noyau un moment magnétique ($S=3/2$) avec quatre états possibles $S = \pm 3/2$ et $\pm 1/2$. En revanche, en coquille, le moment magnétique ($\sigma=1$) présente trois états $\sigma = \pm 1$ et 0 .

Nous avons l'Hamiltonien suivant pour décrire le système étudié:

$$\mathcal{H} = -J_C \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_S \sum_{\langle k,l \rangle} S_k S_l - J_{CS} \sum_{\langle m,n \rangle} \sigma_m S_n - H \left(\sum_i \sigma_i + \sum_j S_j \right) - D \left(\sum_i \sigma_i^2 + \sum_j S_j^2 \right) \quad (\text{V.1})$$

Avec $\langle i, j \rangle$, $\langle k, l \rangle$ et $\langle m, n \rangle$ représentent les premiers sites voisins (i et j), (k et l) et (m et n), respectivement. J_S , J_{CS} et J_C sont les constantes de couplage d'échange entre deux premiers atomes voisins les plus proches avec des spins CC (dans le noyau), SS (dans la coquille) et CS (entre le noyau et la coquille), respectivement (voir figure V.1).

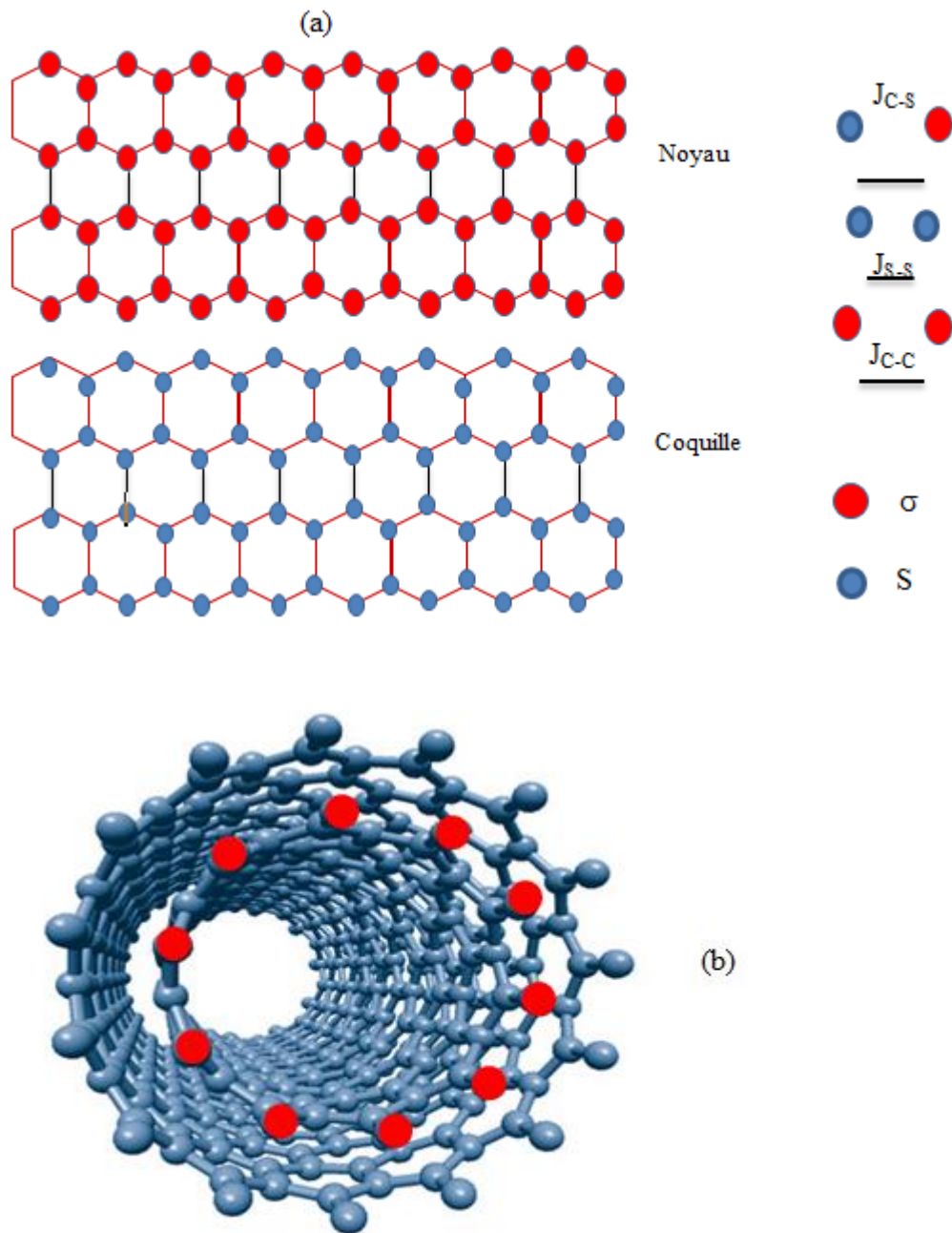


Figure V.1: Représentation schématique d'une structure noyau-coquille d'un nanotube (a) en 2D et (b) en 3D.

V.3 Etude des diagrammes phase de l'état fondamental

Les diagrammes de phase des états fondamentaux servent à établir les états les plus stables du système à très basse température et à prédire l'ordre magnétique dominant dans cette structure. Ces diagrammes de phase sont obtenus à la température absolue (0K). En effet, nous utilisons

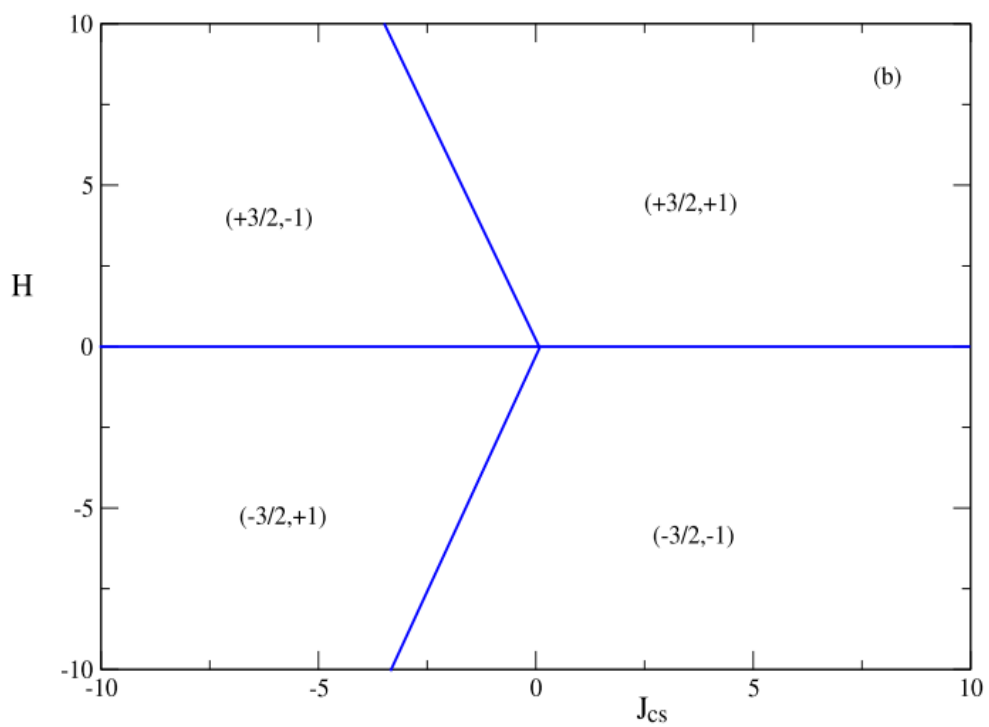
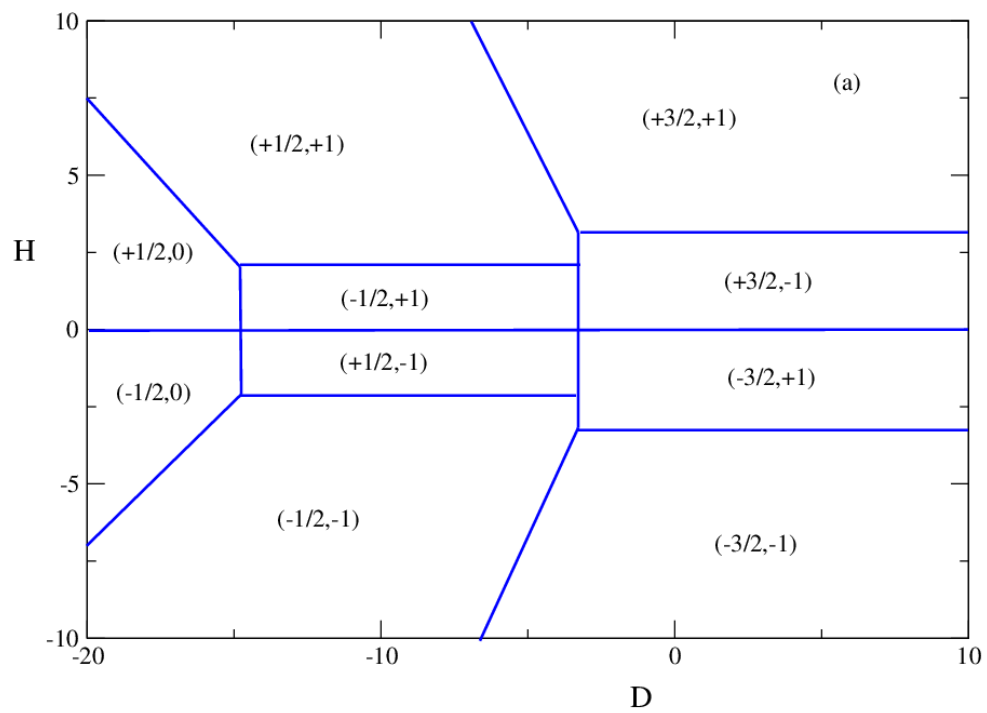
l'Hamiltonien proposé dans l'équation (V.1) pour calculer les énergies du système pour différentes valeurs de spins.

À cet égard, nous avons présenté dans les Figures V. 2 (a-d) les diagrammes de phase de l'état fondamental du nanotube avec des spins mixtes $S=3/2$ et $\sigma=1$ dans différents plans et pour plusieurs paramètres. Ce modèle présente : $(3=2\sigma+1) \times (4=2S+1) = 12$ configurations possibles.

La figure V.2a, évalue l'impact du champ cristallin et du champ magnétique externe. Pour cette raison, nous présentons dans le plan (H, D) , pour des valeurs des interactions de couplage d'échange fixes $J_C = 1$, $J_S = 5$ et $J_{CS} = -1$. D'après cette figure, on déduit que dix phases sont stables à partir de 12 configurations possibles. Ces configurations stables sont: $(+3/2, +1)$, $(+3/2, -1)$, $(+1/2, +1)$, $(+1/2, -1)$, $(-1/2, +1)$, $(-1/2, -1)$, $(-1/2, 0)$, $(+1/2, 0)$, $(-3/2, +1)$ et $(-3/2, -1)$. En fait, l'existence de ces différentes configurations stables est due à la compétition entre différents paramètres physiques à savoir les interactions de couplage d'échange, le champ magnétique externe et le champ cristallin.

Ensuite, la figure V.2b, est illustrée dans le plan (H, J_{CS}) , pour $J_C = 1$ et $J_S = 5$. Sur cette figure, il n'y a que quatre phases stables, qui sont : $(+3/2, -1)$, $(+3/2, +1)$, $(-3/2, +1)$ et $(-3/2, -1)$. Alors que, sur la figure V.2c tracée dans le plan (H, J_C) , huit phases sont stables, à savoir : $(+1/2, +1)$, $(-1/2, +1)$, $(+1/2, -1)$, $(-1/2, -1)$, $(+3/2, -1)$, $(+3/2, +1)$, $(-3/2, +1)$ et $(-3/2, -1)$. Les figures 2a, 2b et 2c, obtenues en l'absence de champ cristallin et pour $J_{CS} = -1$ et $J_S = 5$, présentent une symétrie parfaite par rapport à l'axe du champ magnétique externe $H = 0$.

Enfin, pour explorer l'effet du paramètre de couplage d'échange dans la coque J_S et le champ magnétique externe H , nous traçons la figure V.2d dans le plan (H, J_S) . Elle est illustrée pour les interactions de couplage d'échange fixe $J_C = 1$, $J_{CS} = -1$ et $D=0$. Cette dernière montre six phases stables, qui sont : $(+3/2, 0)$; $(+3/2, +1)$; $(+3/2, -1)$; $(-3/2, 0)$; $(-3/2, +1)$ et $(-3/2, -1)$. D'après les figures V.2 (c-d), on remarque que les quatre phases stables qui correspondent au moment de spin extremum $(\pm 3/2, \pm 1)$ n'apparaissent que lorsque J_S et J_C sont positifs.



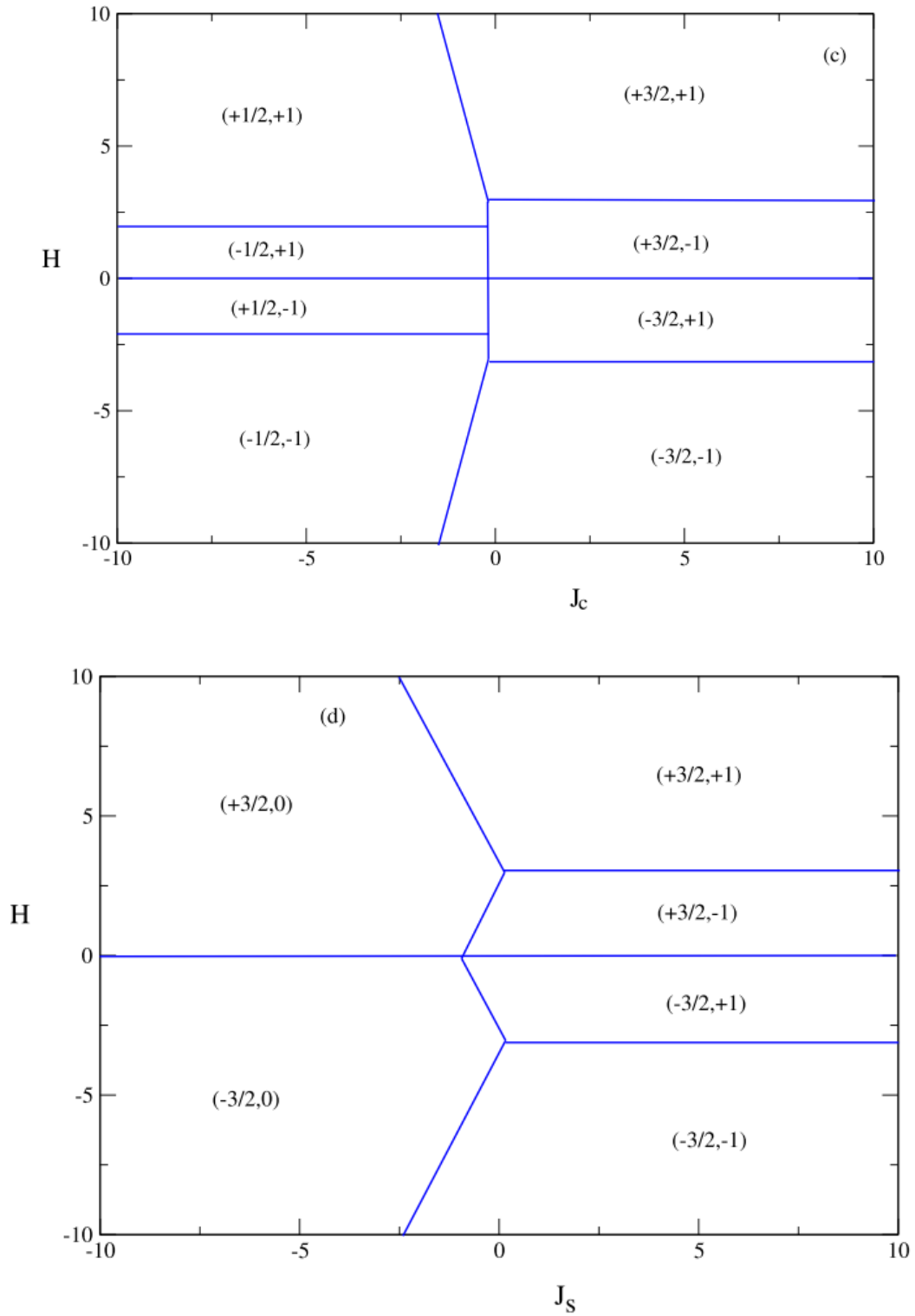


Figure V.2: Diagrammes de phase de l'état fondamental d'une structure nanotubes de type noyau-coquille dans les plans (H, D) pour $J_s = 5$, $J_c = 1$ et $J_{cs} = -1$ **(a)**, (H, J_{cs}) pour $J_s = 5$, $J_c = 1$ et $D = 0$ **(b)**, (H, J_c) pour $J_s = 5$, $J_{cs} = -1$ et $D = 0$ **(c)**, (H, J_s) pour $D = 0$, $J_c = 1$ et $J_{cs} = -1$ **(d)**.

V.4 Résultats de la simulation Monte Carlo

Pour des valeurs non nulles de la température, nous effectuons des simulations par la méthode de Monte Carlo afin d'étudier les propriétés magnétiques de cet alliage binaire, en se basant sur l'algorithme Metropolis. Ainsi, le calcul des paramètres physiques tels que les aimantations, les susceptibilités magnétiques sous l'effet des différents couplages et du champ cristallin du système est effectué. Ces différents paramètres physiques sont calculés avec les expressions suivantes :

L'aimantation du système est donnée par:

$$M_{tot} = \frac{M_s + M_\sigma}{2} \quad (\text{V.2})$$

La susceptibilité magnétique totale est :

$$\chi_{tot} = \frac{\chi_s + \chi_\sigma}{2} \quad (\text{V.3})$$

L'énergie totale du système par site est :

$$E = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} \quad (\text{V.4})$$

Dans cette partie, nous étudions la variation des aimantations et des susceptibilités en fonction de la température d'une structure de type nanotube noyau-coquille anti-ferrimagnétique. Sur la figure V3a, nous présentons le comportement thermique des aimantations partielles et totale pour des valeurs des coefficients de couplage d'échange fixe: $J_s = 5$, $J_c = 1$ et $J_{cs} = -1$, en l'absence des deux champs: $D = 0$ et $H = 0$. Dans ce cas, le système affiche une température de compensation qui correspond à une valeur nulle de l'aimantation totale. Dans un tel cas, le système est dans sa phase super-paramagnétique. En fait, ce comportement est dû à la compétition entre les interactions de couplage d'échange du noyau et de la coquille. Cette température de compensation se situe à la valeur $T_{comp} \approx 6$ pour les paramètres sélectionnés. De plus, l'aimantation totale décroît vers une température de blocage T_B qui correspond à une aimantation totale nulle où le système atteint la phase paramagnétique ($M_{tot} \approx 0$). Par ailleurs, tout en conservant les mêmes valeurs, la figure V.3b, montre le comportement thermique des susceptibilités. Il est clair que la susceptibilité totale montre deux pics : le premier pic correspond au point d'inflexion correspondant à la phase super-paramagnétique, tandis que le second pic indique la valeur de température de blocage $T_B \approx 14$. En effet, la température de

transition correspond au passage entre les phases anti-ferrimagnétique ($M_{\text{tot}} \neq 0$) et paramagnétique ($M_{\text{tot}} = 0$), également appelée température de blocage T_B .

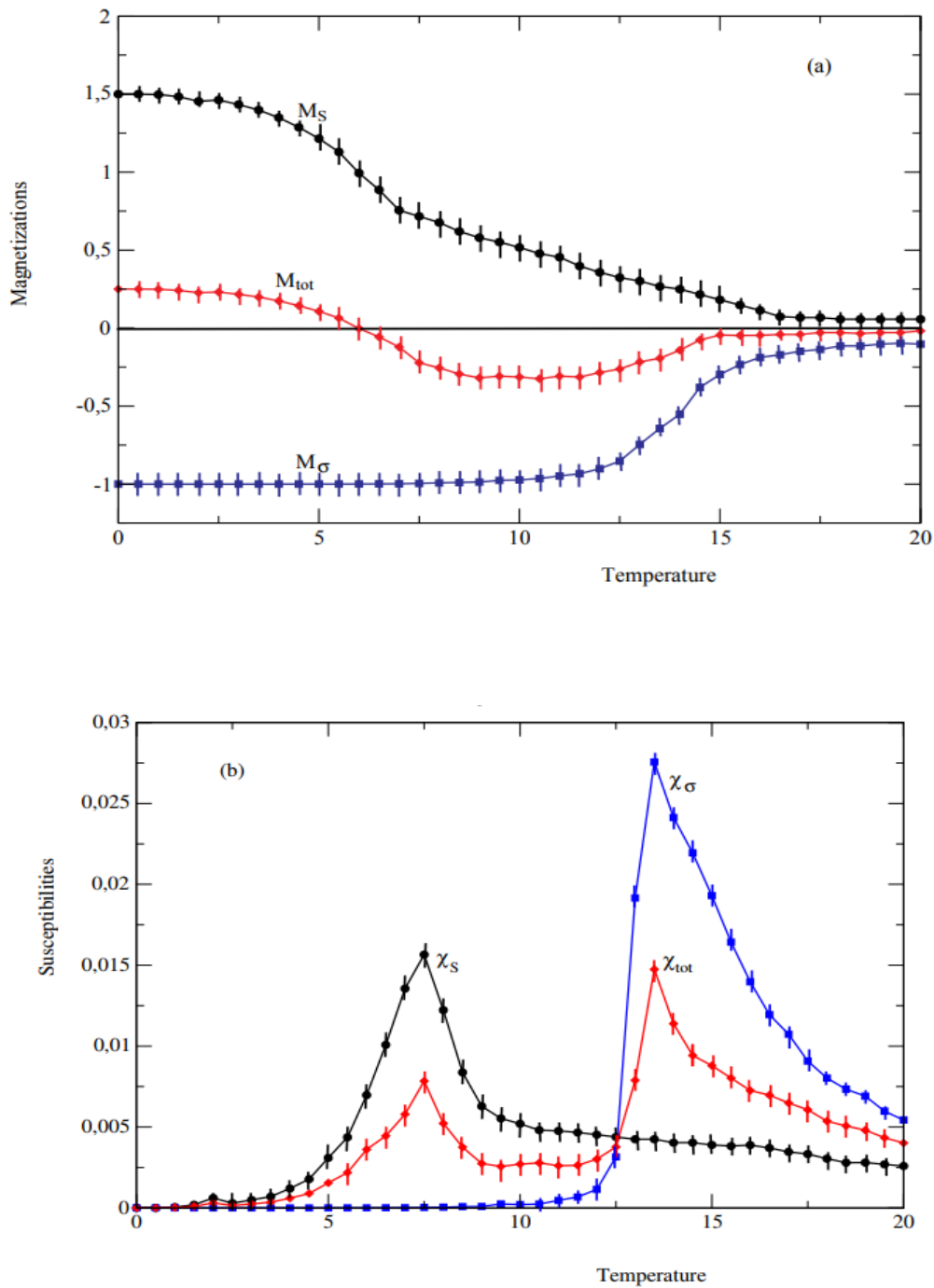


Figure V.3 : Comportements thermiques des aimantations (a) et des susceptibilités (b) avec les barres d'erreurs pour valeurs de paramètres fixes : $D=0$, $H=0$, $J_C=-1$, $J_S=5$ et $J_C=1$.

V.4.1 Effet du couplage des spins S dans la coquille J_S

Dans le but d'étudier l'effet de l'interaction du couplage d'échange dans la coquille (J_S) sur les températures de compensation et de blocage, les figures VI.4a et 4b montrent la variation de l'aimantation et de la susceptibilité en fonction de la température pour $J_C = -1$ et $J_C = 1$. Ces figures sont tracées en l'absence de champ cristallin et du champ magnétique externe et pour des valeurs sélectionnées de J_S ($J_S = 2, 3, 4$ et 5). Sur la figure V.4a, l'aimantation M_{tot} est égale à sa valeur maximale $M_{tot} = \frac{3/2-1}{2} = 0.25$ pour $T=0K$. Par ailleurs, la valeur de la température de compensation est très légèrement affectée par la variation de l'interaction de couplage d'échange J_S , alors que la valeur de la température de blocage augmente nettement par l'augmentation de la valeur de ce paramètre (J_S). Ces résultats sont confirmés par les pics de la susceptibilité observés sur la figure V.4b. En effet, pour les valeurs de $J_S \leq 2$ pour lesquelles il n'y a pas de compensation, la susceptibilité affiche un seul pic correspondant à la température de blocage, alors que pour $J_S \geq 3$, le système indique deux pics, le premier correspond à la compensation, tandis que le second correspond à la température de blocage. Nous notons que les températures de blocage obtenues pour les valeurs des paramètres $J_S = 2, 3, 4$ et 5 sont $T_B \approx 7,5, 9,2, 12,2$ et $14,8$, respectivement.

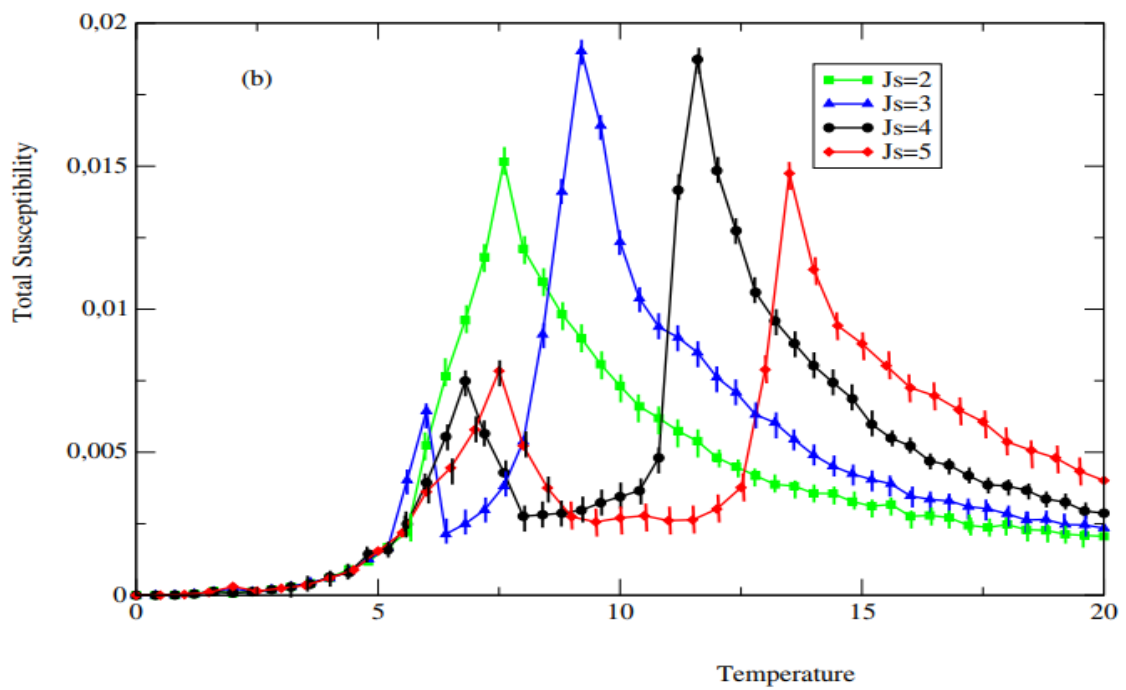
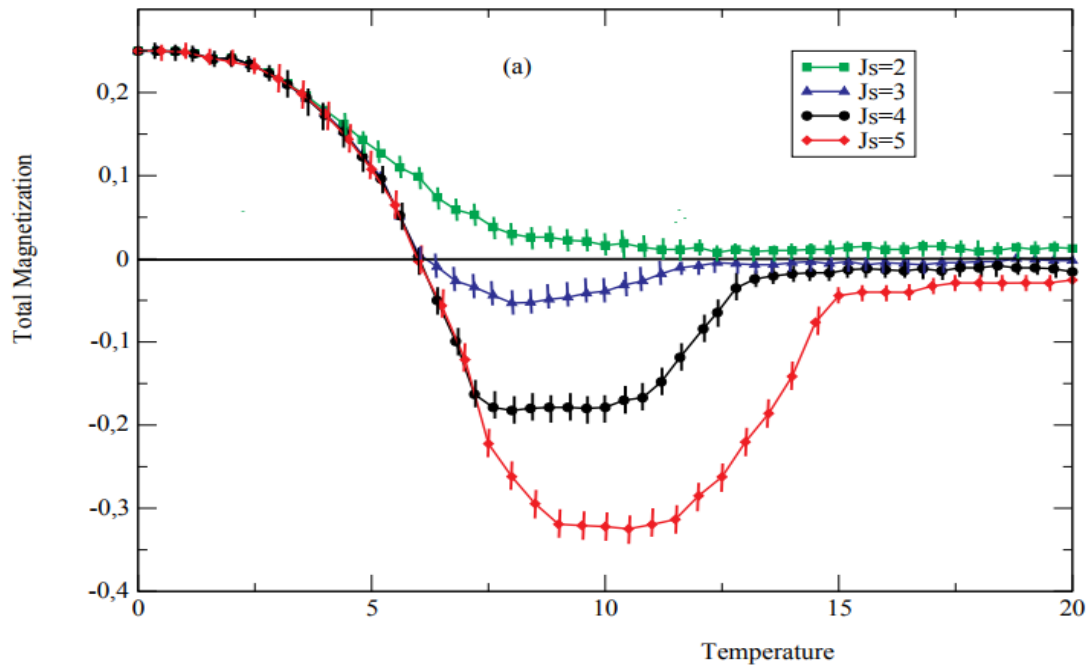


Figure V.4 : Comportement thermique des aimantations **(a)** et des susceptibilités **(b)**, pour valeurs de paramètres fixes : $D=0$, $H=0$, $J_{CS} = -1$, $J_S=5$ and $J_C=1$.

V.4.2 Effet du couplage J_{CS} des spins entre le noyau et la coquille

Pour étudier l'impact du couplage d'échange anti-ferrimagnétique J_{CS} sur les températures de compensation et de blocage, nous présentons les figures VI.5a et 5b. En l'absence des champs magnétique externe et cristallin, ces figures sont tracées pour différentes valeurs du paramètre de couplage d'échange anti-ferrimagnétique J_{CS} ($J_{CS} = -0,5, -1, -2, -3$ et -5). Les deux figures VI.5a et 5b sont illustrées pour des valeurs fixes de paramètres de l'interaction de couplage d'échange dans le noyau $J_C = 1$ et dans la coquille $J_S = 5$. A partir de ces figures, le système révèle une valeur de température de compensation T_{comp} si $|J_{CS}| < 6$, tandis que pour $|J_{CS}| \geq 6$, la phase super-paramagnétique (correspondant à T_{comp}) est inexistante.

On note que la température de compensation (T_{comp}) augmente lors de l'augmentation du paramètre en valeur absolue $|J_{CS}|$. Ceci peut s'expliquer par le fait que lorsque l'interaction entre les atomes du noyau et ceux de la coquille est plus importante, le système persiste plus longtemps dans son état ordonné même lorsque la température est légèrement augmentée. Les valeurs de température de compensation correspondantes, pour $|J_{CS}| = 0.5, 1, 2, 3$ et 5 , sont respectivement $T_{comp} \approx 5.3, 6, 7.8, 9.2$ et 11.4 .

Suivant le même raisonnement, la valeur de la température de blocage (T_B) augmente lors de l'augmentation du paramètre de couplage d'échange $|J_{CS}|$, pour les mêmes raisons évoquées ci-dessus. De plus, les valeurs de températures de blocage obtenues pour $|J_{CS}| = 0.5, 1, 2, 3, 5$ et 6 sont $T_B \approx 13.2, 13.5, 14, 14.8, 15.2$ et 15.6 , respectivement. Les résultats obtenus sont essentiellement dus à l'interaction anti-ferrimagnétique entre le noyau et la coquille ($J_{CS} < 0$).

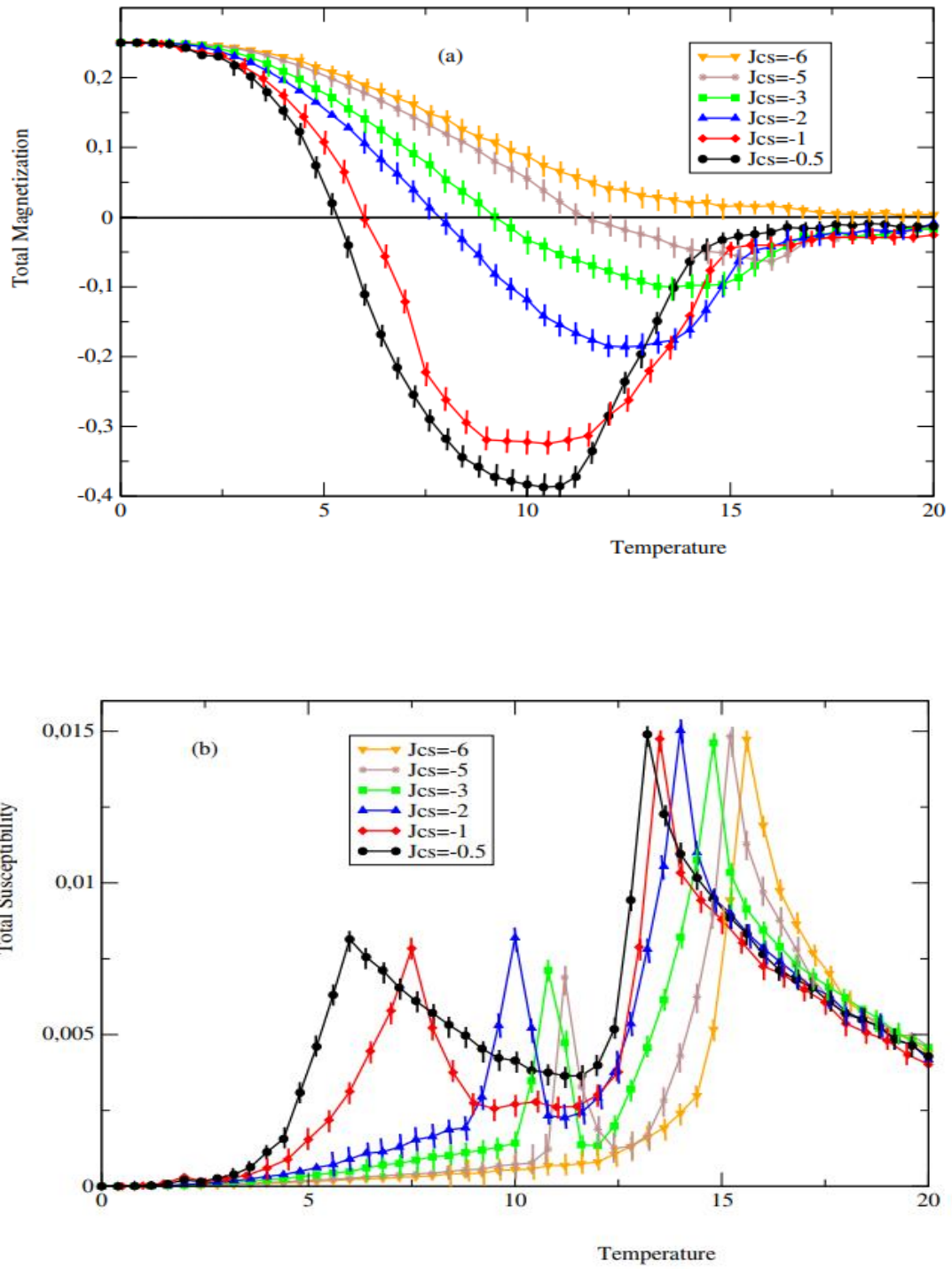
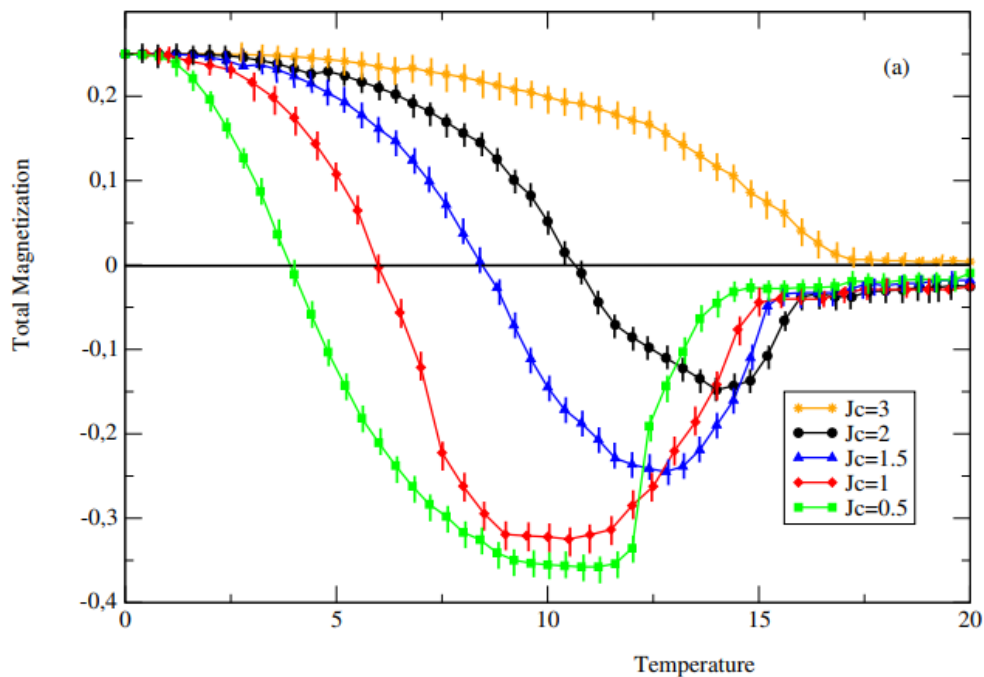


Figure V.5: Comportement thermique des aimantations (a) et des susceptibilités (b), pour valeurs de paramètres fixes: $D=0$, $H=0$, $J_C=1$ et $J_S=5$.

V.4.3 Effet du couplage J_C des spins du noyau

Maintenant, nous illustrons les Figures VI.6a et 6b pour différentes valeurs de l'interaction de couplage d'échange ($J_C = 0.5, 1, 1.5, 2$ et 3) et pour des valeurs de paramètres fixes: $H = 0$, $D = 0$, $J_{CS} = -1$ et $J_S = 5$.

A partir de ces figures, nous voyons que la température de compensation (T_{comp}) et la température de blocage augmentent en augmentant le paramètre J_C . En effet, l'augmentation de J_C favorise la cohésion entre les atomes, ce qui permet au système de rester davantage dans son état ordonné. On note que la température de compensation disparaît pour $J_C \geq 3$. Les valeurs de température de compensation obtenues, pour chaque valeur de $J_C = 0.5, 1, 1.5$ et 2 sont respectivement $T_{comp} \approx 3.9, 6, 8.5$ et 10.6 . De même, les températures de blocage obtenues pour $J_C = 0.5, 1, 1.5, 2$ et 3 sont $T_B \approx 12.8, 13.5, 14, 14.4$ et 15.6 , respectivement.



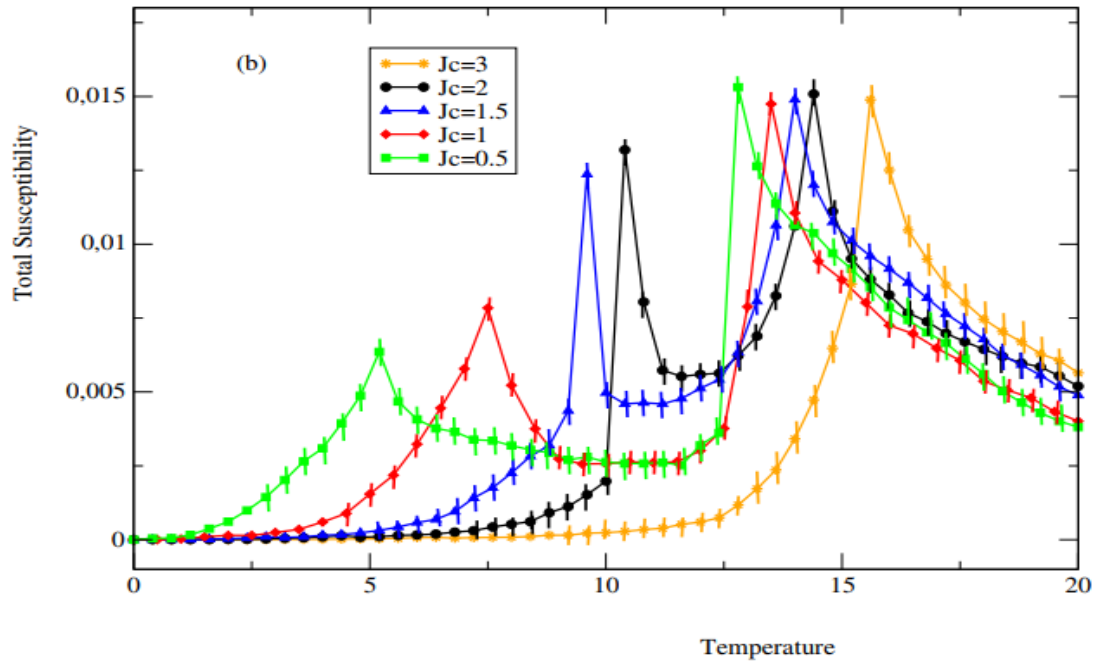


Figure V.5: Aimantations thermiques (a) et susceptibilités (b) avec barres d'erreur pour valeurs de paramètres fixes: $D=0$, $H=0$, $J_{CS} = -1$ and $J_S=5$.

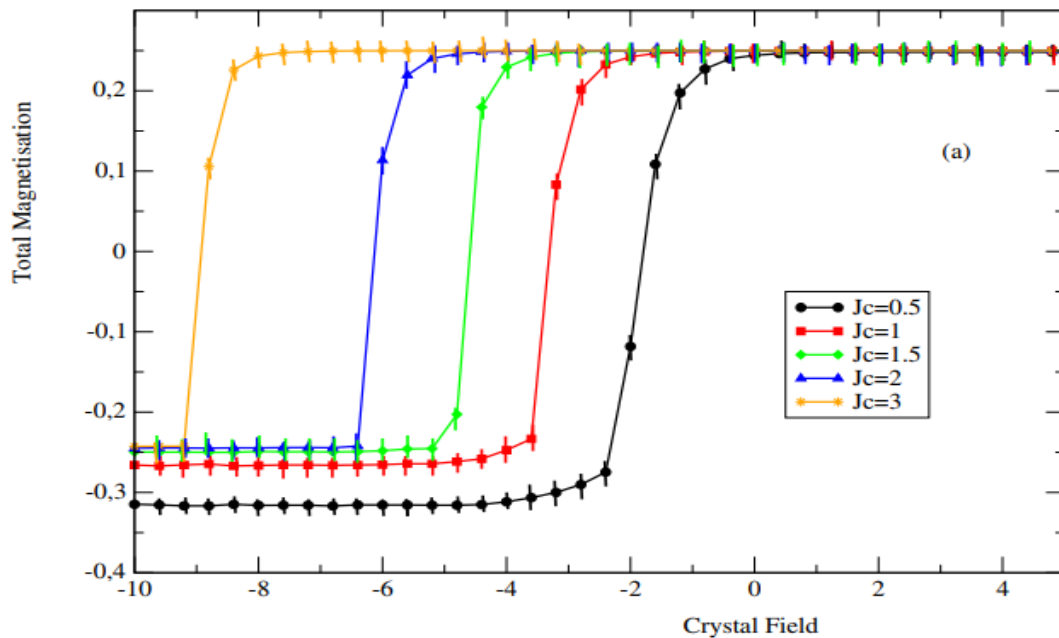
V.4.4 : Effet du champ cristallin et des couplages sur les comportements de l'aimantation du système

Pour étudier le comportement de l'aimantation totale (M_{tot}) en fonction du champ cristallin (D), nous traçons les figures VI.7a et 7c, pour une valeur de température fixe $T=1$ et en absence de champ magnétique externe ($H = 0$). La figure V.7a est obtenue pour des valeurs de paramètres fixes $J_{CS} = -1$ et $J_S = 5$ et pour différentes valeurs de J_C ($J_C = 0.5, 1, 1.5, 2$ et 3). Sur cette figure, pour les valeurs du champ cristallin D inférieures à une certaine valeur appelée D_C , l'aimantation totale reste constante. La valeur de D_C dépend en grande partie du paramètre J_C et est égale à $0, -2, -4, -5$ et -8 , respectivement pour les valeurs de J_C citées ci-dessus. Nous notons qu'au point $D = D_C$, l'aimantation totale M_{tot} subit une transition du premier ordre pour atteindre sa valeur de saturation égale à $0,25$ indépendamment de J_C .

D'autre part, la figure V.7b est tracée pour des valeurs fixes du paramètre J_{SC} ($J_{CS} = -1$, $J_C = 1$) et pour des valeurs sélectionnées de J_S . Dans le cas où $J_{SC} < 3$, nous distinguons trois domaines qui dépendent de la valeur de ce couplage. Par contre, pour $J_S \geq 3$, seules deux régions persistent.

En fait, pour $J_S < 3$, les aimantations totales sont constantes dans la première région. Ensuite, ces aimantations totales diminuent en subissant une transition de premier ordre. Dans la deuxième région, M_{tot} reste constante et presque égale à $-0,26$. Puis M_{tot} subit une transition du second ordre pour atteindre la troisième région où elle est égale à sa valeur de saturation ($0,25$). Cependant, pour $J_S \geq 3$ la première phase disparaît et l'aimantation totale passe de la phase où $M_{\text{tot}} \approx -0,26$ à la phase de saturation ($M_{\text{tot}} = 0,25$) à l'aide d'une transition du second ordre.

La figure V.7c est tracée pour des valeurs fixes des paramètres $J_S = 5$ et $J_C = 1$ et pour diverses valeurs de J_{CS} . Dans ce cas, le système présente deux régions. La largeur de chaque région dépend largement de la valeur du paramètre $|J_{CS}|$. En effet, dans la première région M_{tot} est négative et augmente en valeur absolue, pour un champ cristallin donné, en augmentant $|J_{CS}|$. En revanche, dans la seconde région, toutes les courbes convergent vers la saturation ($M_{\text{tot}} = 0,25$). De plus, toutes les aimantations subissent une transition de deuxième ordre entre les deux régions, sauf celles qui correspondent à $|J_{CS}| \geq 5$, leur transition est du premier ordre.



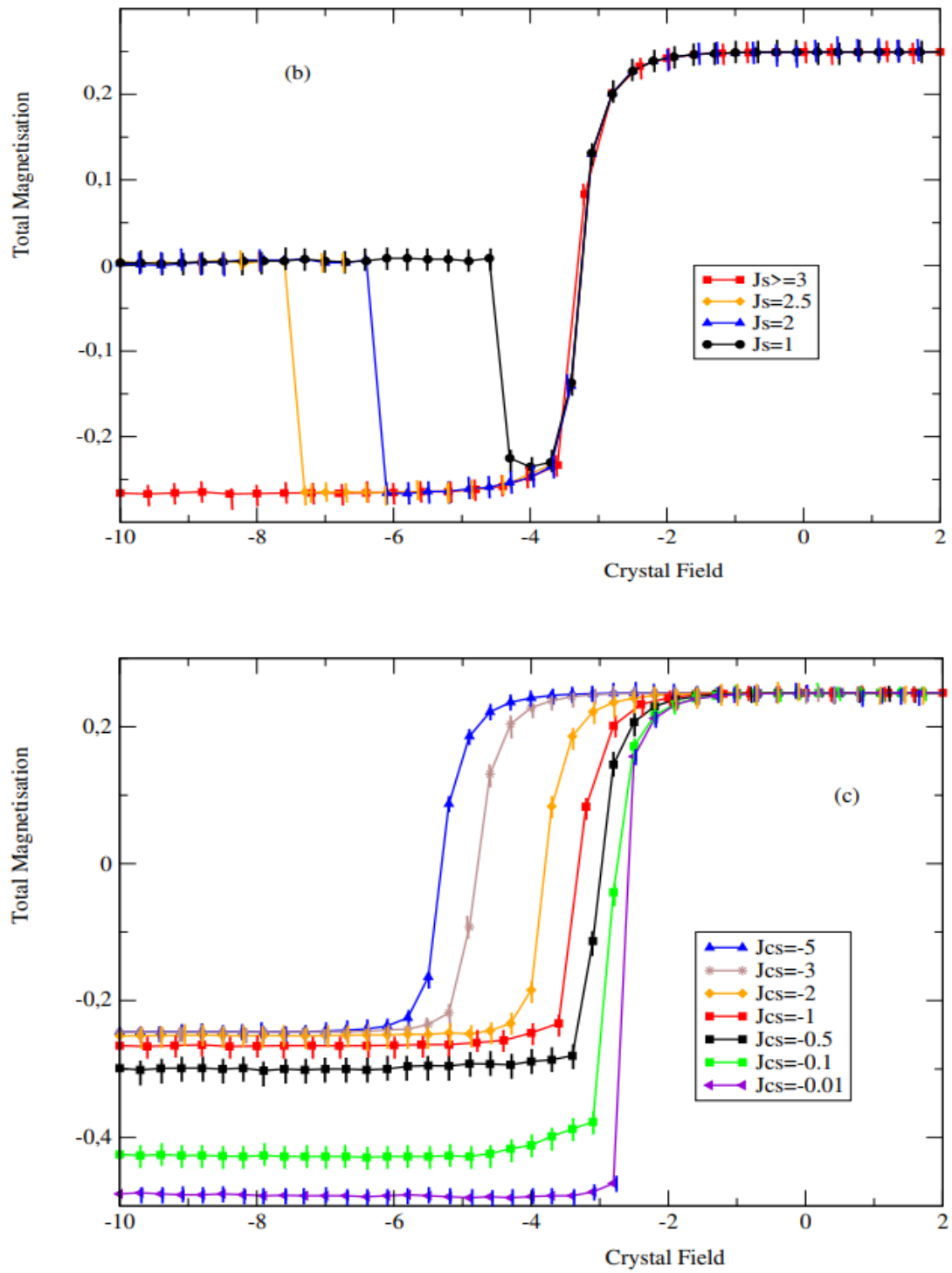


Figure V.7 : Aimantation totale en fonction du champ cristallin pour $H = 0$, $T = 1$: (a) $J_{CS} = -1$ et $J_S = 5$ (b) $J_{CS} = -1$ et $J_C = 1$ (c) $J_C = 1$ et $J_S = 5$.

V.4.3 Comportement de la température de blocage

Afin d'étudier le comportement de la température de blocage avec la variation du couplage noyau-coquille J_{CS} , nous avons collecté les résultats obtenus sur la figure V.5b pour tracer la figure V.8. Cette figure est obtenue pour les valeurs fixes des paramètres $J_C = 1$ et $J_S = 5$, en l'absence à la fois du champ cristallin et du champ magnétique externe $D = 0$ et $H = 0$. La figure V.8 confirme le comportement de la température de blocage en fonction de J_{CS} déjà observé sur la figure V.5b. Il est clair que la température de blocage augmente lors de l'augmentation de J_{CS} en valeur absolue.

Par ailleurs, le comportement de la température de blocage T_B en fonction du coefficient de couplage d'échange dans le noyau J_C est illustré sur la figure V.9, pour des valeurs fixes des paramètres suivants : $J_{CS} = -1$, $J_S = 5$, $D = 0$ et $H = 0$. Cette figure est tracée en utilisant les résultats de la figure V. 6. Il est évident que la température de blocage T_B augmente presque linéairement avec J_C .

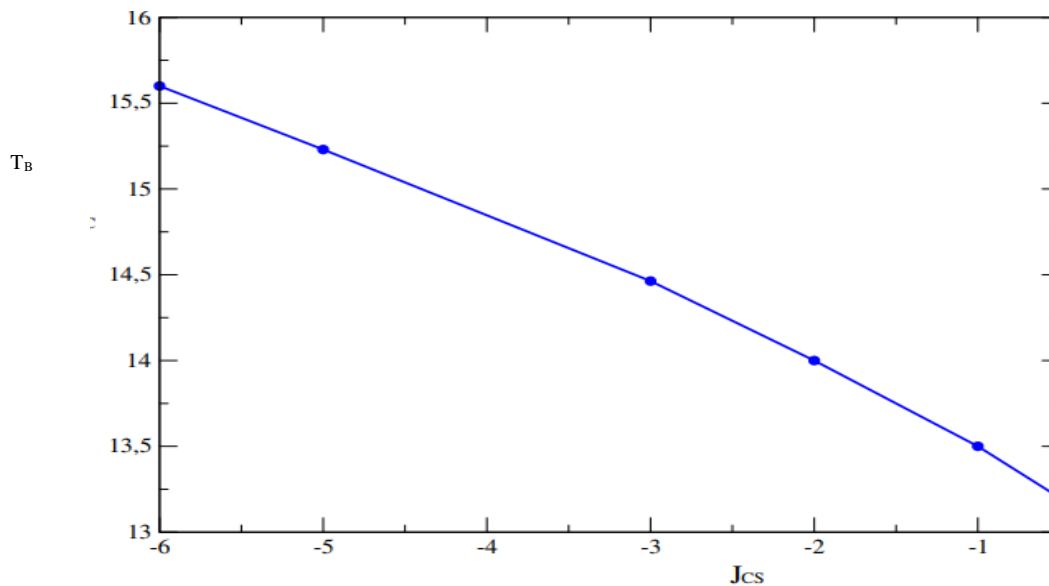


Figure V.8: Température de blocage T_B en fonction de J_{CS} pour des valeurs de paramètres fixes: $D = 0$, $H = 0$, $J_C = 1$ et $J_S = 5$.

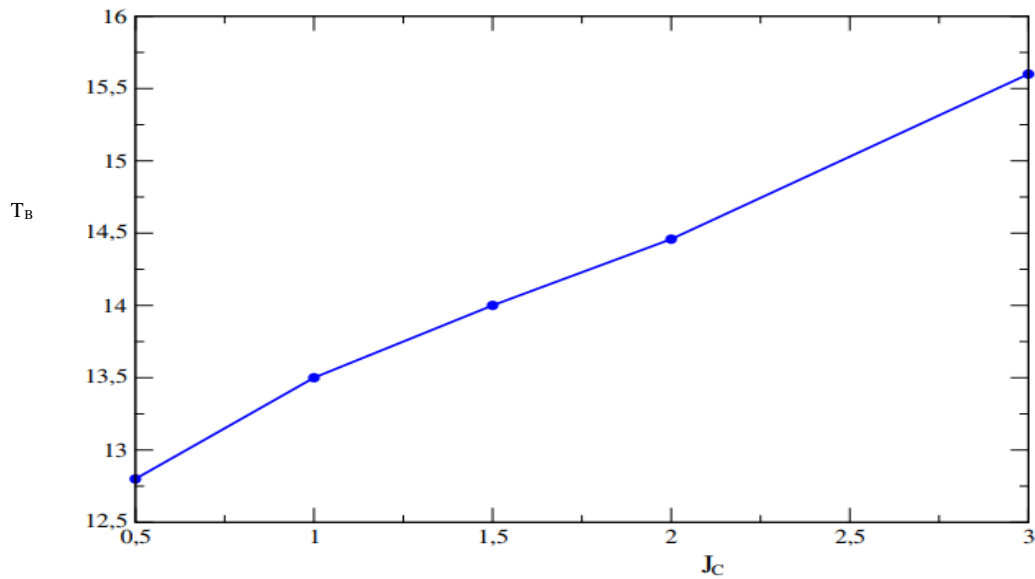


Figure V.9: Température de blocage T_B en fonction de J_C pour des valeurs de paramètres fixes: $J_{CS} = -1$ et $J_S = 5$, et $D = 0$, $H = 0$.

V.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés magnétiques et thermodynamiques de la structure de nanotubes anti-ferrimagnétiques type noyau-coquille avec des spins $\sigma = 3/2$ (dans le noyau) et $S = 1$ (dans la coquille), par la méthode de Monte Carlo.

Les diagrammes de phase de l'état fondamental dans divers plans ont été élaborés. Une symétrie parfaite concernant l'axe $H = 0$ a été trouvée dans les deux plans (H, J_{CS}) et (H, J_C) . En outre, nous avons examiné l'effet des coefficients d'interactions d'échange, dans le noyau, dans la coquille et entre noyau et coquille, sur les températures de compensation et de blocage du système. Les températures de compensation et de blocage augmentent en augmentant l'un des paramètres de couplage d'échange, J_C , J_S ou $|J_{CS}|$. Cela a été attribué au renforcement de la cohésion entre les spins. En outre, l'aimantation totale (M_{tot}) en fonction du champ cristallin (D) a été inspectée, pour plusieurs valeurs des couplages d'échange dans la coquille (J_S), dans le noyau (J_C) et entre noyau et coquille (J_{CS}).

CHAPITRE VI :
COMPORTEMENT DE LA TEMPERATURE DE COMPENSATION DANS
UNE STRUCTURE CORE-SHELL DE NANOTUBES AVEC INTERACTIONS
RKKY : SIMULATION DE MONTE CARLO

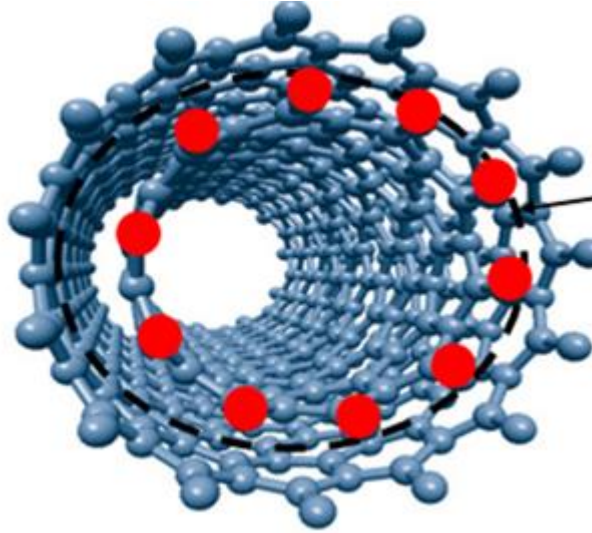
VI.1 Introduction

L'étude des propriétés magnétiques des nanotubes est d'une grande importance. En effet, plusieurs travaux de recherche ont été consacrés aux nanotubes comme, notamment : l'influence de la température et du potentiel d'électrodéposition sur les propriétés magnétiques de la structure des nanotubes de nickel [225], les propriétés magnétiques et électriques du nanotube de carbone [226] et les propriétés magnétiques du nano-fil de fer encapsulé dans des nanotubes de carbone dopés au cuivre [227]. De plus, les ponts atomiques covalents permettent une amélioration unidirectionnelle du transport électronique dans les nanotubes de carbone alignés [228].

Le but de ce chapitre est d'étudier les propriétés magnétiques et l'influence du champ cristallin de la structure nanotube noyau-coquille en présence des interactions de type R_{KKY} (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) à l'aide des simulations de Monte Carlo (MCS). En effet, dans cette partie, nous étudions un système constitué par une structure 'core-shell' de nanotubes magnétiques, avec des spins mixtes $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ (dans le noyau) et $S = \pm 1,0$ (dans la coque), séparés par un nombre L de nanotubes non magnétiques. Les interactions de couplage d'échange R_{KKY} (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) [229,234] agissent entre les atomes du noyau et ceux appartenant à la coquille à travers les couches non magnétiques intermédiaires.

VII.2 Théorie et modèle

L'étude de notre structure noyau-coquille de nanotubes est faite dans le cadre de conditions aux limites libres. Le système est composé de spins mixtes $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ (dans le noyau) et $S = \pm 1,0$ (dans la coquille), séparés par un nombre L de nanotubes non magnétiques. Le nombre total de spins du système est $N = N_{\sigma} + N_S = 128$ avec $N_{\sigma} = 64$ et $N_S = 64$ (voir Figure VI. 1).



Nanotubes non-magnétiques

Figure VI.1: Représentation schématique d'une structure noyau-coquille de nanotubes.

L'Hamiltonien de la structure noyau-coquille du nanotube étudié est donné par :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_S \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_C \sum_{\langle k,l \rangle} \sigma_k \sigma_l - J_{\text{RKKY}} \sum_{\langle m,n \rangle} S_m \sigma_n \\ & -H \sum_i (S_i + \sigma_i) - D_S \sum_i S_i^2 - D_\sigma \sum_j \sigma_j^2 \end{aligned} \quad (\text{VII. 1})$$

Où J_S et J_C représentent les interactions de couplage d'échange entre les atomes voisins les plus proches dans le noyau et dans la coquille, respectivement. Les notations $\langle i, j \rangle$, $\langle k, l \rangle$ et $\langle m, n \rangle$ représentent des spins proches voisins. J_{RKKY} signifie l'interaction entre les atomes du noyau et ceux de la coquille à travers les nanotubes non magnétiques. H est le champ magnétique externe. Les champs cristallins appelés D_S et D_σ sont créés par les spins S et σ , respectivement. En vue de simplifier nos calculs, nous prendrons identiques les champs cristallins agissant dans la coquille et dans le noyau : $D = D_S = D_\sigma$.

L'interaction J_{RKKY} , entre les atomes du noyau et ceux de la coquille est définie comme suit:

$$J_{\text{RKKY}} = \frac{a^2 J_0}{L^2} \cos(K_f L) \quad (\text{VI.2})$$

Le coefficient ‘**a**’ représente la constante de réseau, J_0 est la constante de couplage magnétique, K_f désigne l’énergie de Fermi et prend la valeur 0.5. De plus, la quantité a^2J_0 est prise égale à 1 comme dans la référence [48].

Les aimantations partielles du core et du shell, et l’aimantation totale sont données par:

$$M_S = \frac{1}{N_S} \sum_i S_i \quad (\text{VI.3})$$

$$M_\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \sum_j \sigma_j \quad (\text{VI.4})$$

$$M_{\text{tot}} = \frac{M_S + M_\sigma}{2} \quad (\text{VI.5})$$

N_σ et N_S sont respectivement les nombres de spins σ et S .

Les susceptibilités magnétiques partielles et totales sont données par:

$$\chi_S = \beta(\langle M_S^2 \rangle - \langle M_S \rangle^2) \quad (\text{VI.6})$$

$$\chi_\sigma = \beta(\langle M_\sigma^2 \rangle - \langle M_\sigma \rangle^2) \quad (\text{VI.7})$$

$$\chi_{\text{tot}} = \frac{\chi_S + \chi_\sigma}{2} \quad (\text{VI.8})$$

Où $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B est la constante de Boltzmann. T désigne la température absolue.

VI.3 Etude des diagrammes de phase de l’état fondamental ($T=0$).

Dans cette partie, nous étudions les diagrammes de phase de l’état fondamental basés sur l’Hamiltonien de l’équation (VI.1) régissant la structure du nanotube noyau-coquille. A cet effet, nous présentons sur les Figures VI.2 (a-f) les diagrammes de phase correspondants dans le cadre du modèle de Blume-Capel à spins mixtes $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ et $S = \pm 1, 0$. Ces figures sont tracées dans différents plans de paramètres physiques. Dans le présent modèle, nous avons $3 \times 4 = 12$ configurations possibles. Pour tracer les diagrammes de phase de l’état

fondamental, nous avons adopté le cas particulier d'un seul tube intermédiaire non-magnétique ($L = 1$).

Présentée dans le plan (H, D), la figure VI.2a montre l'impact du champ cristallin et du champ magnétique externe sur les configurations stables. Cette figure est obtenue pour des interactions de couplage d'échange fixes : dans le noyau $J_C = 1$ et dans la coquille $J_S = 1$. Cette figure montre que seules six phases sont stables parmi les douze configurations possibles. Ces configurations stables sont $(+3/2, +1)$; $(+1/2, +1)$; $(+1/2, 0)$; $(-1/2, 0)$; $(-1/2, -1)$ et $(-3/2, -1)$. Il est à noter que ces différentes configurations stables apparaissent toutes pour $D < 0$.

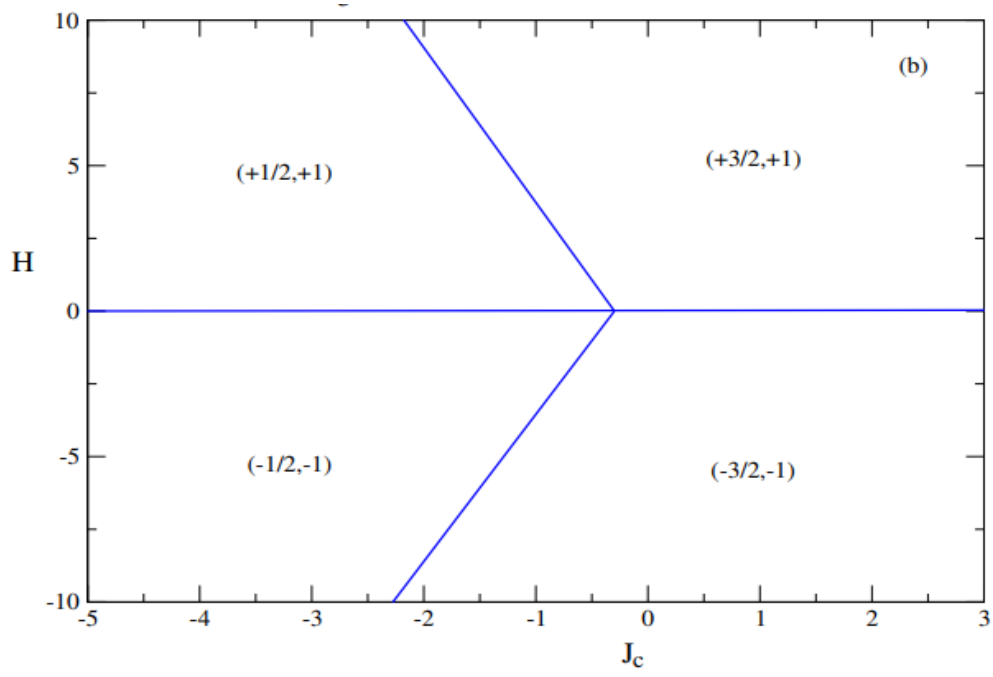
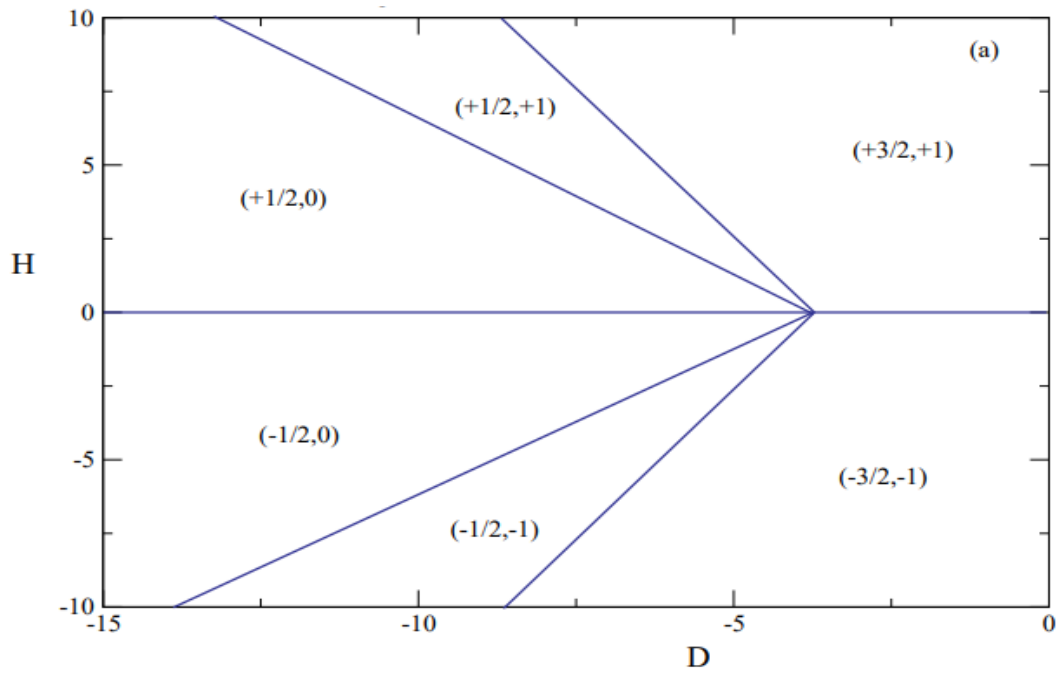
La figure VI.2b est illustrée dans le plan (H, J_C), en l'absence du champ cristallin ($D = 0$) et pour l'interaction de couplage d'échange fixe $J_S = 1$. Dans le plan (H, J_C), seules quatre phases sont stables à savoir : $(+1/2, +1)$; $(+3/2, +1)$; $(-1/2, -1)$ et $(-3/2, 1)$.

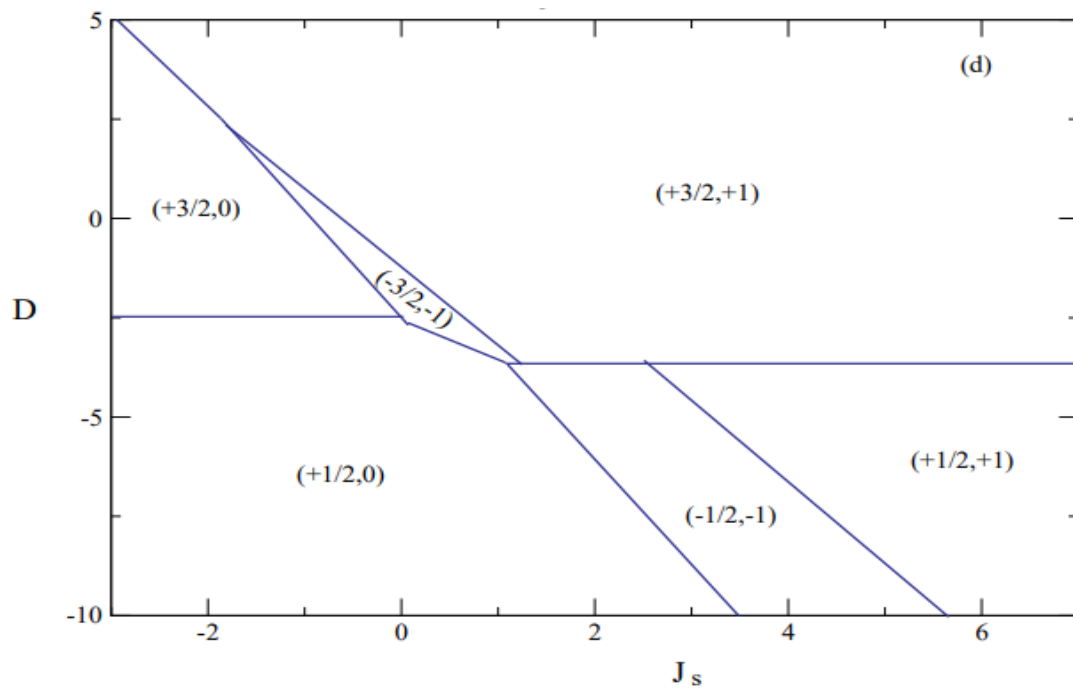
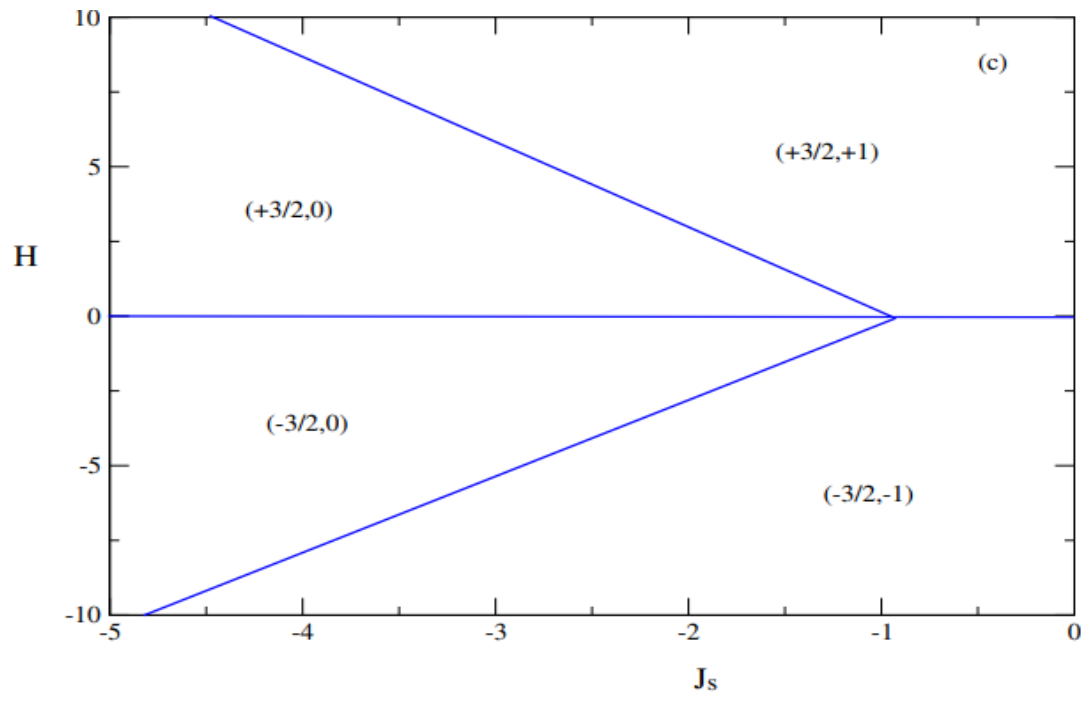
Par ailleurs, la figure VI.2c, est tracée dans le plan (H, J_S), en l'absence du champ cristallin ($D = 0$) et pour l'interaction de couplage d'échange fixe dans le noyau, $J_C = 1$. Cette figure présente les quatre phases stables suivantes : $(+3/2, 0)$; $(+3/2, +1)$; $(-3/2, 0)$ et $(-3/2, -1)$.

Il est à noter que les Figures VI.2 (a-c) présentent une symétrie parfaite par rapport à l'axe du champ magnétique externe $H = 0$.

Pour explorer l'effet du paramètre de couplage d'échange J_S et du champ cristallin D , nous traçons la figure VI.2d dans le plan (D, J_S). Cette figure est illustrée en l'absence du champ magnétique externe ($H = 0$) et pour une valeur fixe de l'interaction de couplage d'échange dans le noyau, $J_C = 1$. Cette figure présente six phases stables, à savoir : $(+3/2, 0)$; $(+3/2, +1)$; $(-3/2, -1)$; $(+1/2, 0)$; $(-1/2, -1)$ et $(+1/2, +1)$.

Pour compléter cette étude, nous élucidons sur la figure VI.2e les configurations stables dans le plan (D, J_C) en l'absence de champ magnétique externe ($H = 0$). Cette figure est tracée pour une valeur de paramètre de couplage d'échange fixe dans la coquille, $J_S = 1$. Seules six phases stables sont présentes. Nous mentionnons que toutes les configurations stables trouvées dans cette figure sont celles déjà obtenues dans le plan (D, J_S).





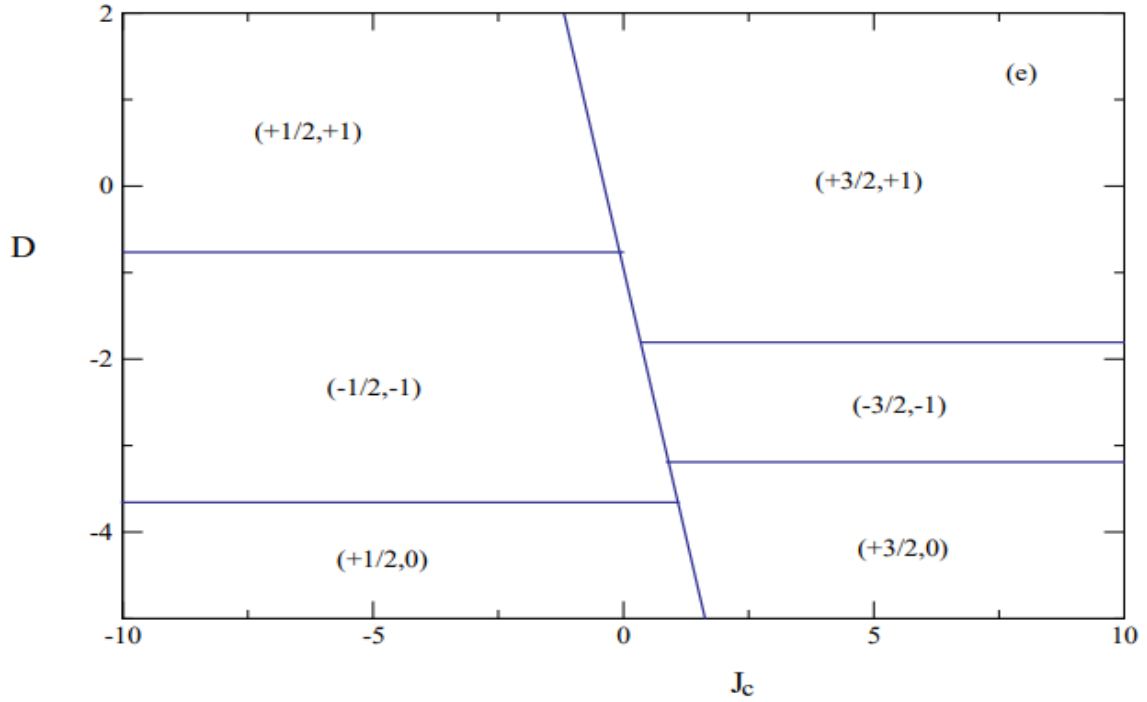


Figure VI.2: Diagrammes de phase de l'état fondamental pour $L = 1$, dans les plans: (a) (H , D), $J_c=1$ et $J_s=1$, (b) (H , J_c), $J_s=1$ et $D=0$, (c) (H , J_s), $J_c=1$ et $D=0$, (d) (D , J_s), $J_c=1$ et $H=0$, (e) (D , J_c), $J_s=1$ and $H=0$.

VI.4 Résultats des simulations Monte Carlo

VI.4.1 Les variations thermiques des aimantations et des susceptibilités sous l'effet des couplages.

Dans cette partie, nous étudions l'effet des interactions J_{RKKY} sur les propriétés magnétiques de la structure nanotube noyau-coquille. Sur la figure VI.3a, nous présentons le comportement des aimantations thermiques partielles (M_S et M_σ) et totale (M_{tot}). Cette figure est tracée en l'absence des deux champs magnétique externe et cristallin ($H = 0$ et $D = 0$), pour un nombre de nanotubes non magnétiques $L = 5$, pour un couplage d'échange dans le noyau $J_c = 2$ et pour un couplage d'échange dans la coquille $J_s = 0,1$. On constate que l'aimantation totale diminue vers une température de transition T_r caractérisant la phase paramagnétique du système ($M_{\text{tot}} \approx 0$). De plus, le système présente une température de compensation correspondant à une valeur de l'aimantation totale nulle. En effet, ce comportement est dû à la compétition entre les interactions de couplage d'échange dans le noyau et celui dans la

coquille. Cette température de compensation se situe à la valeur $T_{\text{comp}} \approx 0,5$ pour les paramètres sélectionnés. Par ailleurs, nous représentons la figure VI.3b pour les mêmes valeurs de paramètres physiques que sur la figure VI.3a. Cette figure illustre les comportements thermiques des susceptibilités magnétiques partielles (χ_S , χ_σ) et totale (χ_{tot}). Cependant, la susceptibilité magnétique totale montre deux pics. Le premier pic correspond au point d'inflexion situé à proximité de la température de compensation, tandis que le second pic montre l'emplacement de la température de transition ($T_r \approx 4.86$). En fait, T_r indique la transition entre les phases ferrimagnétique ($M_{\text{tot}} \neq 0$) et paramagnétique ($M_{\text{tot}} = 0$).

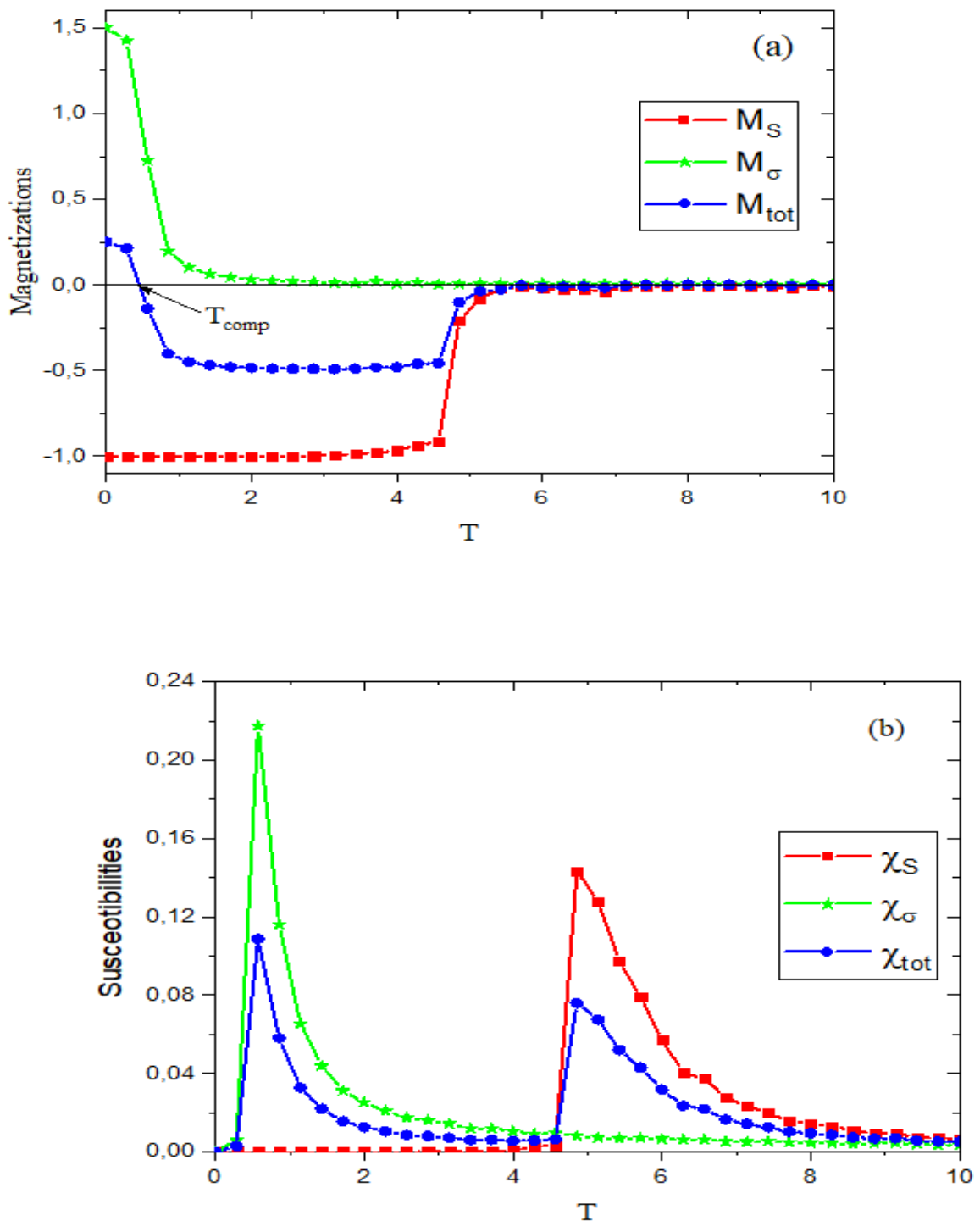
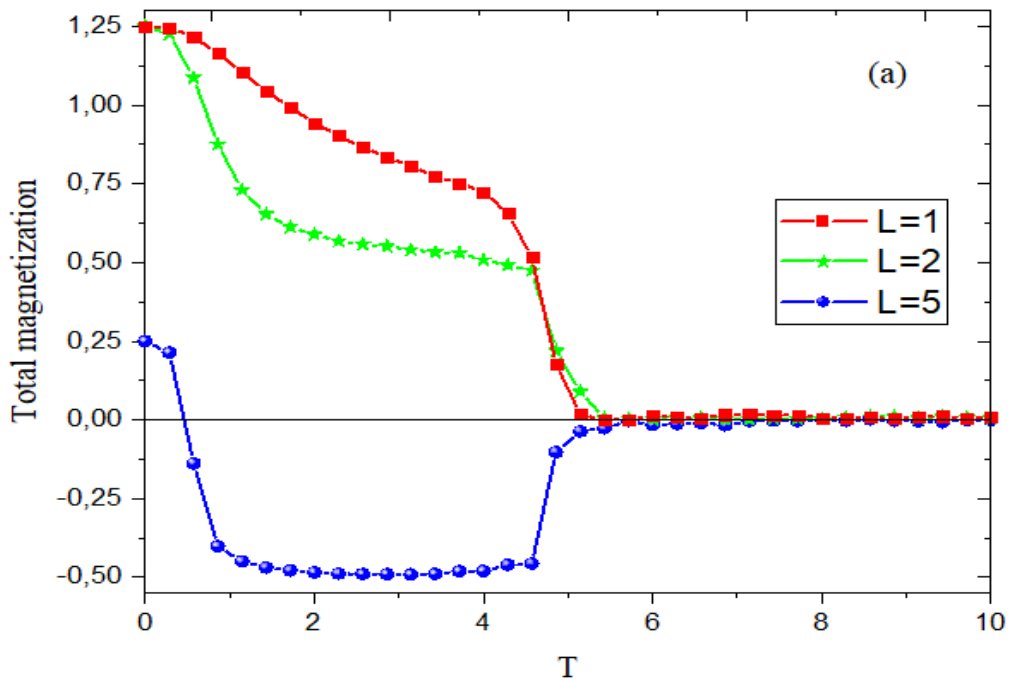


Figure VI.3: Aimantations (a) et susceptibilités (b) thermiques pour des valeurs de paramètres fixes : $D=0$, $H=0$, $L=5$ et $J_S=2$ and $J_C=0.1$.

Pour cerner l'effet du nombre L de nanotubes non magnétiques sur les comportements thermiques des aimantations et des susceptibilités totales, nous illustrons sur les Figures VI.4a et 4b les résultats obtenus. Ces figures sont tracées pour différents nombres de nanotubes non magnétiques intermédiaires ($L = 1$, $L = 2$ et $L = 5$), en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe ($D = 0$, $H = 0$) et pour des valeurs de paramètres fixes : $J_S = 2$ et $J_C = 0,1$. La figure VI.4a montre que la température de compensation (T_{comp}) apparaît uniquement pour $L = 5$ du fait que le paramètre J_{RKKY} est anti-ferrimagnétique ($J_{\text{RKKY}} < 0$). Par ailleurs, pour les cas $L = 1$ et $L = 2$, le couplage J_{RKKY} est ferrimagnétique ($J_{\text{RKKY}} > 0$), aucune compensation n'est observée. De plus, sur la figure VI.4b, la susceptibilité magnétique totale présente deux pics. Le premier correspond au point d'inflexion lié à T_{comp} , alors que le deuxième pic correspond à la température de transition (T_r). Les valeurs des températures de compensation obtenues sont comme suit : $T_{\text{comp}} \approx 0,5$, pour le cas $L=5$ nanotubes non magnétiques. En outre, la température de transition obtenue pour $L = 1$ est égale à $T_r \approx 4,30$ tandis que celle obtenue pour $L = 2$ et 5 est de $T_r \approx 4,86$.



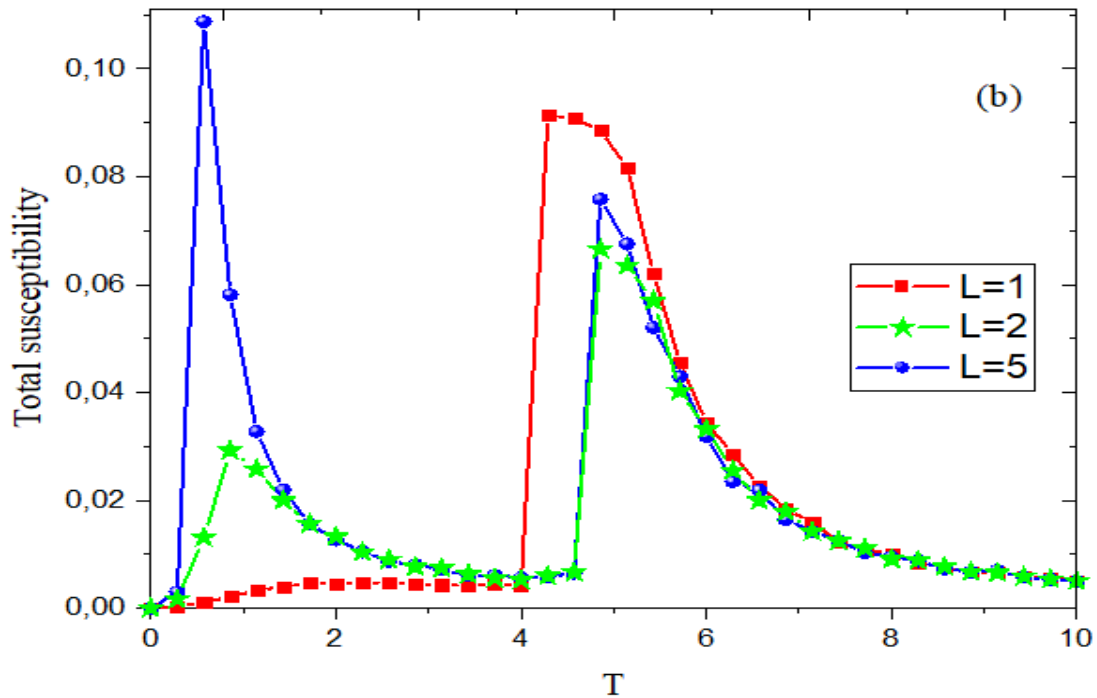


Figure VI.4: Aimantations (a) et susceptibilités (b) thermiques pour des valeurs de paramètres fixes : $D=0$, $H=0$, $J_S=2$ et $J_C=0.1$.

Afin d'étudier les effets de l'interaction de couplage d'échange entre les atomes de la coquille (J_S) sur les températures de compensation et de transition, nous traçons les figures VI. 5a et 5b pour différentes valeurs du paramètre de couplage d'échange ($J_S = 1, 2, 3$) et en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe ($D = 0$ et $H = 0$). Ces figures sont obtenues pour un nombre de nanotubes non magnétiques $L=5$ et pour une valeur d'interaction de couplage d'échange $J_C = 0,1$.

Les figures VI. 5a et 5b montrent que la valeur de la température de compensation n'est pas influencée par la variation du paramètre d'interaction de couplage d'échange J_S . Alors que la valeur de la température de transition augmente lorsque la valeur de ce paramètre (J_S) augmente. La température de compensation obtenue (T_{comp}) pour toutes les valeurs sélectionnées du paramètre de couplage d'échange J_S est égale à $T_{comp} \approx 0,5$. Par ailleurs, la température de transition obtenue pour les valeurs de paramètre $J_S = 1, 2$ et 3 sont respectivement $T_r \approx 2.57, 4.86$ et 7.43 .

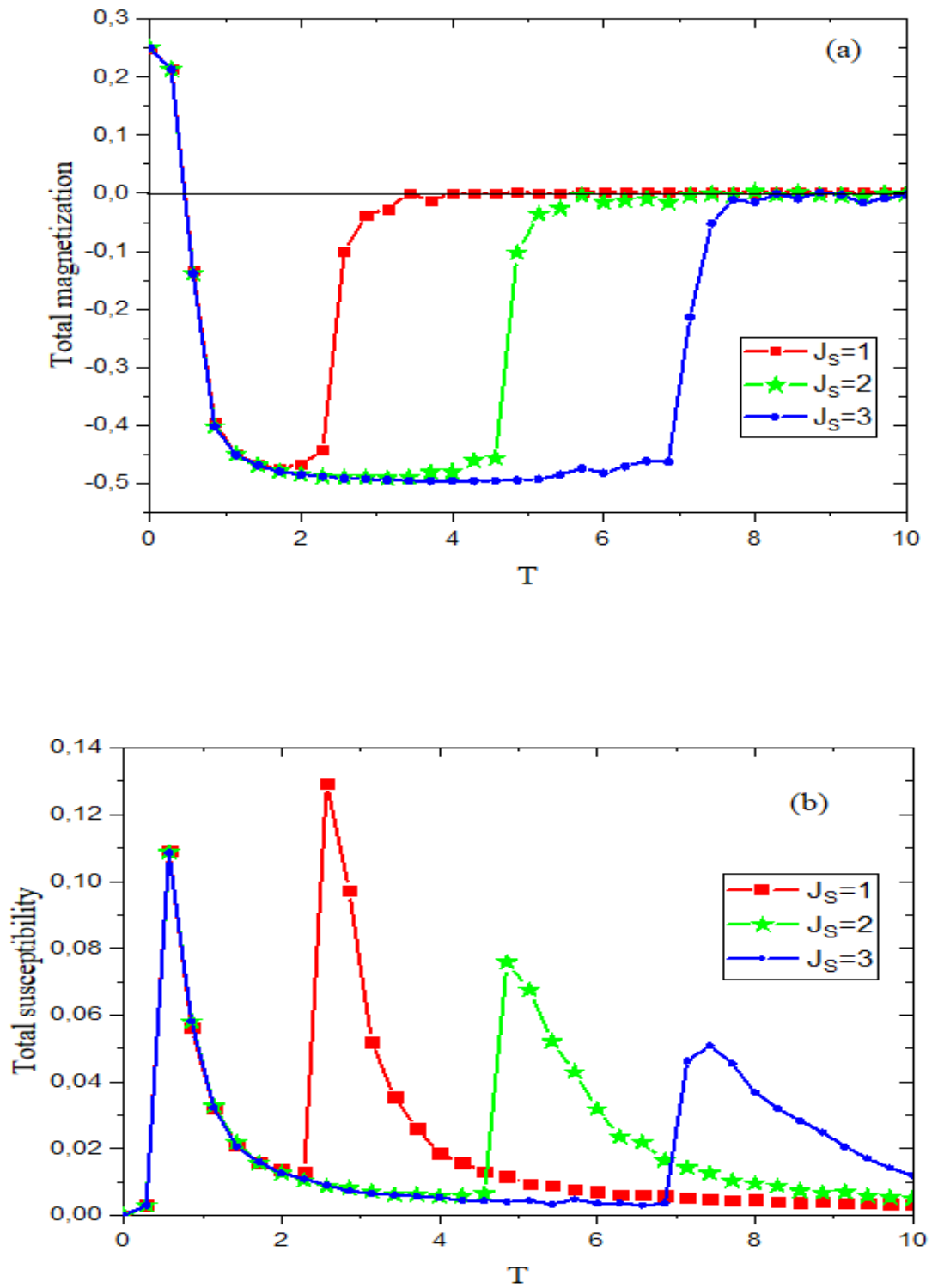
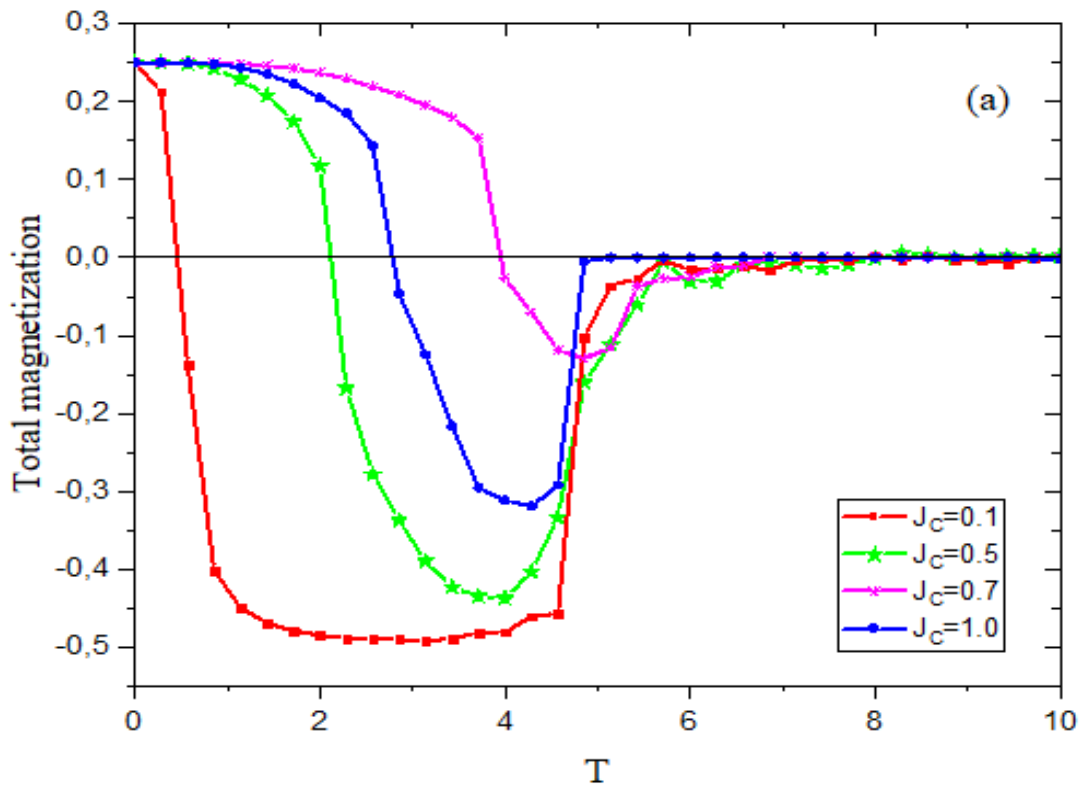


Figure VI.5 : Aimantations (a) et susceptibilités (b) thermiques pour des valeurs de paramètres fixes : $D=0$, $H=0$, $L=5$ et $J_C=0.1$.

Pour des valeurs de paramètres fixes : $D = 0$, $H = 0$, $L = 5$ et $J_s = 2$, les Figures VI. 6a et 6b illustrent les comportements thermiques des aimantations et des susceptibilités totales pour différentes valeurs d'interaction de couplage d'échange ($J_C = 0.1, 0.5, 0.7$ et 1). La Figure VI. 6a montre que la température de compensation (T_{comp}) augmente en augmentant la valeur du paramètre J_C . En revanche, la valeur de la température de transition (T_r) subit une décroissance puis augmente pour des valeurs de J_C supérieures à 0.7 . Les valeurs de température de compensation obtenues, pour $J_C = 0.1, 0.5, 0.7$ et 1 sont respectivement $T_{comp} \approx 0.5, 2.2, 2.85$ et 4.55 . De plus, les températures de transition qui correspondent aux mêmes valeurs du paramètre J_C sont respectivement $T_r \approx 4.86, 4.28, 4.56$ et 5.14 . On note également que lorsque la valeur de J_C augmente d'avantage ($J_C > 1$), la température de compensation disparaît.



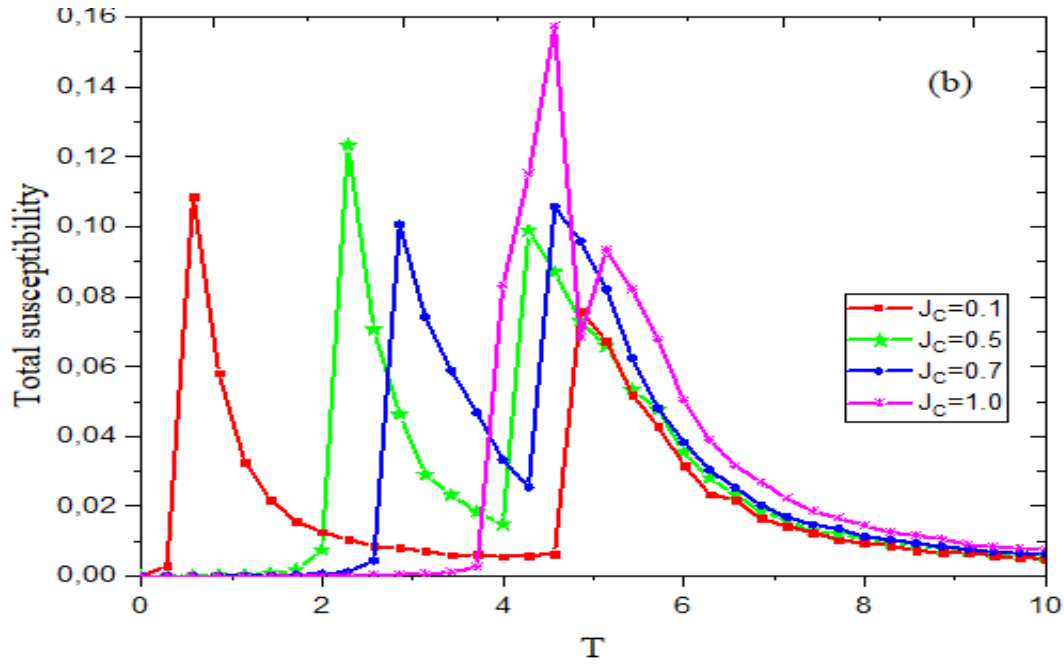


Figure VI.6 : Aimantations (a) et susceptibilités (b) thermiques pour des valeurs de paramètres fixes : $D=0$, $H=0$, $L=5$ et $J_S=2$.

VI.4.2 Cycles d'hystérésis magnétiques

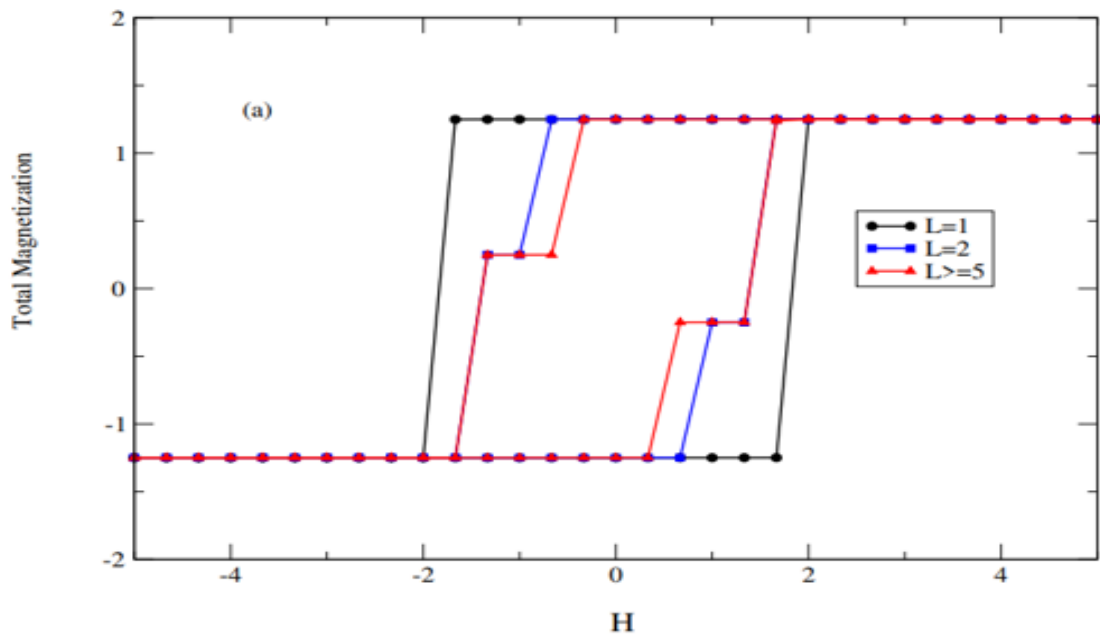
Pour compléter notre étude, nous examinons sur les figures VI.7 (a-d) le comportement des cycles d'hystérésis magnétiques de la structure noyau-coquille de nanotubes en l'absence de champ cristallin ($D = 0$). Ces cycles d'hystérésis magnétiques donnent le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ magnétique externe (H) et mettent en évidence le champ magnétique coercitif (H_C), la saturation de l'aimantation totale et l'aimantation totale rémanente dans le but de fournir des informations sur les phases magnétiques (ferrimagnétique ou paramagnétique).

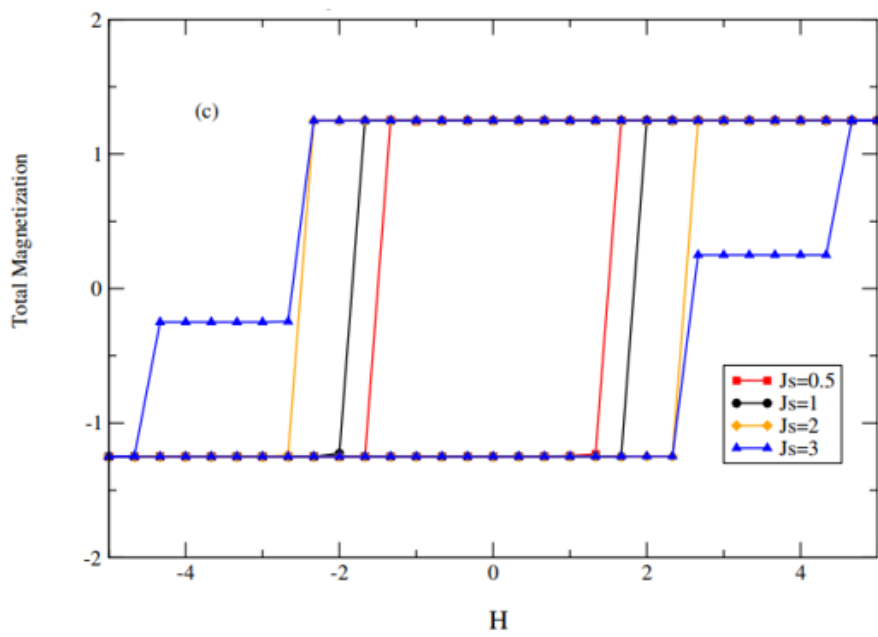
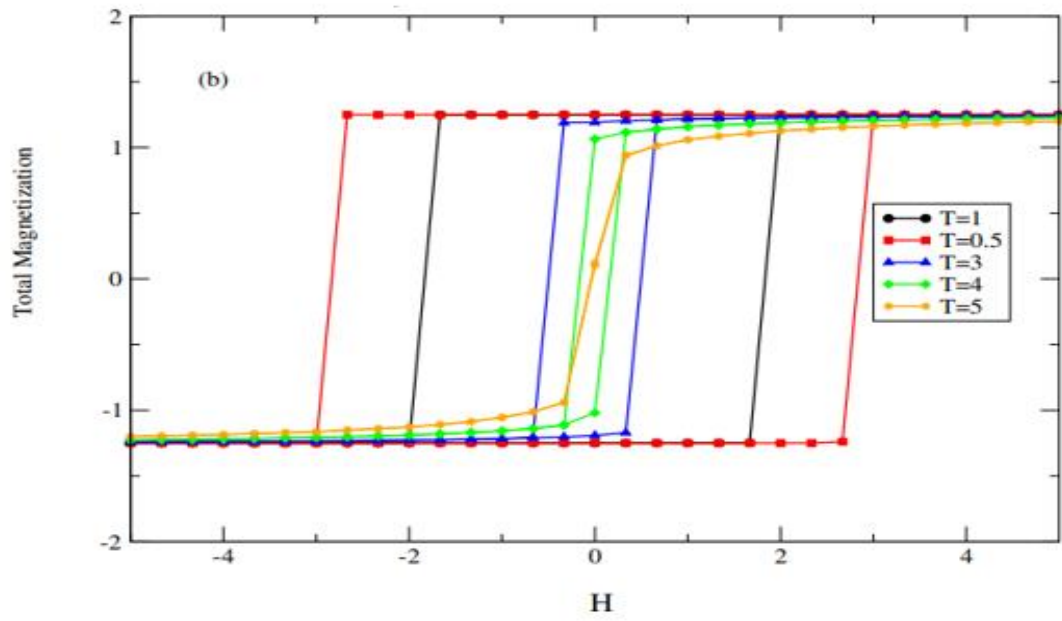
La figure VI.7a est tracée pour différentes valeurs du nombre de nanotubes non magnétiques $L = 1, 2$ et 5 , pour des valeurs de paramètres fixes : $J_S=1$, $J_C=1$ et $T=1$. Cette figure montre la diminution du champ magnétique coercitif (H_C) lors de l'augmentation du nombre de nanotubes non magnétiques (L) ce qui conduit à une diminution de la surface de la boucle. Par ailleurs, pour $L \geq 5$ le champ magnétique coercitif et la surface de la boucle deviennent constants.

En outre, la figure VI.7b est illustrée pour des valeurs sélectionnées de température $T = 0.5, 1, 3, 4$ et 5 et pour des valeurs de paramètres fixes : $J_S=1, J_C=1$ et $L=1$. Sur cette figure, l'augmentation de la température induit une diminution du champ magnétique coercitif donc une diminution de la surface de la boucle du cycle. Le comportement paramagnétique (boucle fermée) est observé pour $T \geq 5$.

De plus, pour explorer l'effet de l'interaction d'échange dans coquille (J_S) sur les cycles d'hystérésis magnétiques, nous avons établis la figure VI.7c pour des valeurs sélectionnées du paramètre de couplage J_S : $J_S = 0.5, 1, 2$ et 3 . Cette figure est tracée pour des valeurs de paramètres fixes : $J_C=1, L=1$ et $T=1$. A partir de cette figure, le champ magnétique coercitif et la surface de la boucle diminuent en diminuant la valeur du paramètre J_S . En effet la diminution de J_S facilite le passage du système de la phase ordonnée à la phase désordonnée.

Enfin, nous étudions sur la figure VI.7d l'effet de l'interaction d'échange du noyau (J_C) sur le comportement du cycle d'hystérésis. Dans cette figure, $J_C = 0.5, 1, 2$ et 3 , pour des valeurs de paramètres fixes, à savoir : $J_S=1, L=1$ et $T=1$. Sur cette figure, nous retrouvons le même comportement du champ coercitif magnétique et de la surface de la boucle obtenue sur la figure VI.7c.





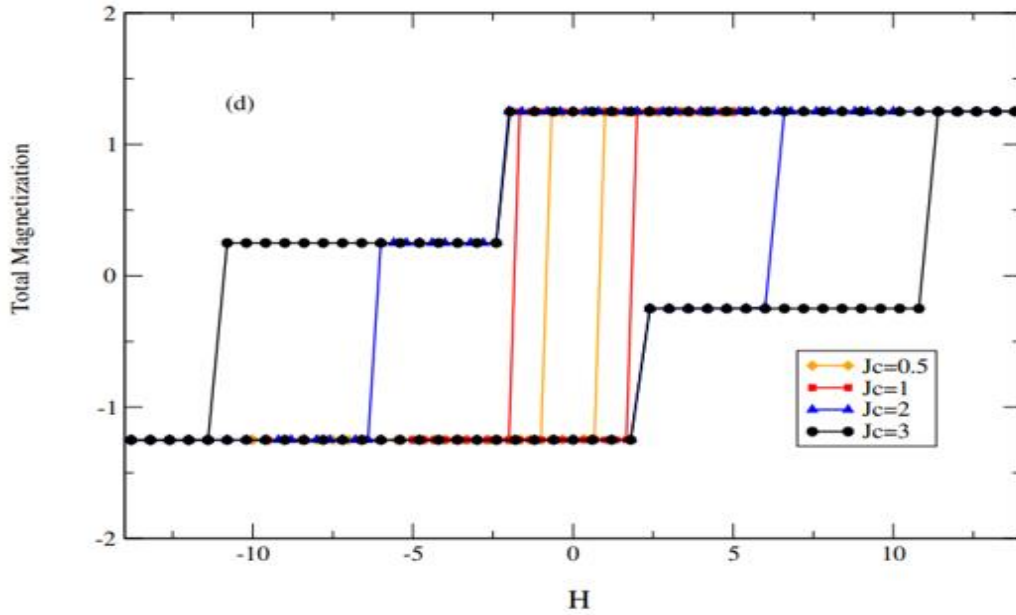


Figure VI.7 : Cycles d'hystérésis magnétiques de la structure noyau-coquille de nanotubes pour $D=0$: (a) $J_S=1$, $J_C=1$ et $T=1$, (b) $J_S=1$, $J_C=1$ et $L=1$, (c) $J_C=1$, $L=1$ et $T=1$, (d) $J_S=1$, $L=1$ et $T=1$.

VI.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés magnétiques de la structure noyau-coquille de nanotubes à spins mixtes $\sigma=3/2$ (noyau) et $S = 1$ (coquille) avec le couplage de type R_{KKY} (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida), à l'aide de simulations de Monte Carlo. Les diagrammes de phase de l'état fondamental dans différents plans ont été établis. De plus, nous avons étudié l'effet des interactions R_{KKY} sur les aimantations et les susceptibilités magnétiques du système. Nous avons constaté que les valeurs de la température de compensation diminuent quand on augmente le nombre de nanotubes non magnétiques (L) et le couplage d'échange de la coquille (J_S). Alors que la température de compensation n'a pas été influencée par la variation de l'interaction d'échange entre les atomes du noyau (J_C). Par ailleurs, l'aimantation totale (M_{tot}) en fonction du champ cristallin (D), (J_S) et (J_C), pour plusieurs valeurs de nanotubes non magnétiques ont été examinés. Finalement, les cycles d'hystérésis magnétiques sont étudiés pour des valeurs de paramètres fixes, tels que L , T , J_S et J_C .

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Ce mémoire de thèse a été consacré à l'étude des propriétés magnétiques et thermiques de quelques nanostructures, notamment : les nanotubes de carbones, le borophene dans leurs structures core-shell, ainsi la structure ferrimagnétique diluée dans deux arrangements atomiques différents à savoir ABA et BAB. Pour ce fait, nous avons utilisé la méthode Monte Carlo.

Pour la structure ferrimagnétique étendue ABA et BAB, nous avons établi les résultats de la simulation de Monte Carlo pour les configurations ABA et BAB montrant que l'aimantation totale et la température de compensation dépendent fortement des valeurs des coefficients d'interaction d'échange et de la dilution. En effet, dans le cas de la configuration ABA, la température de compensation augmente en diminuant la valeur de probabilité p de dilution. Par ailleurs, la configuration BAB présente un comportement opposé en fonction de la probabilité p . La dilution porte uniquement sur les atomes du plan B.

En ce qui concerne la structure du Borophene Core-Shell, les résultats obtenus montrent différents types de topologies de diagrammes de phases. Nous avons discuté en particulier l'influence des interactions d'échange et l'influence du champ cristallin sur les aimantations et sur la compensation du système. Le comportement de la température de compensation varie proportionnellement avec le couplage ferromagnétique entre les spins de la partie Shell. Une diminution de la température de compensation est obtenue lorsque l'interaction de couplage d'échange anti-ferrimagnétique entre le 'core' et le 'shell' augmente. Un résultat remarquable nommé la 'réentrance' est obtenu, cela signifie que pour une valeur de température de compensation, les valeurs croissantes des interactions de couplage d'échange anti-ferrimagnétique conduisent à la transition du système de la phase d'ordre à celle du désordre et vice versa.

Concernant la structure de borophene en alliage binaire, nous avons étudié le comportement des températures de compensation et de transition ainsi que l'effet de la concentration p d'un type de spin sur les propriétés magnétiques et le cycle d'hystérésis. Une augmentation du degré de l'alliage (p augmente) conduit à la diminution de l'aimantation totale du système

conduisant ainsi à une diminution de la température de transition. Ainsi, le point de compensation du champ cristallin augmente avec l'augmentation de la valeur de la concentration p . Ensuite, nous avons montré qu'une augmentation de la valeur du champ cristallin conduit également à une diminution de la surface des boucles d'hystérésis. Par ailleurs, la surface des boucles et le champ magnétique coercitif augmentent avec l'augmentation du couplage d'échange ferromagnétique.

En ce qui concerne la structure nanotube Core-Shell anti-ferrimagnétique, nous avons déterminé les diagrammes de phases dans différents plans. L'étude thermique par la simulation Monte Carlo des comportements de l'aimantation et de la susceptibilité magnétique a permis de mettre en évidence deux températures particulières. Une température de compensation due à la compétition entre les interactions du couplage d'échange entre le 'core' et le 'shell'. Une température de blocage où le système atteint sa phase paramagnétique. Nous avons remarqué que ces températures augmentent en augmentant les couplages du 'shell' et du 'core'.

La même démarche a été entreprise pour la structure nanotube 'Core-Shell' séparée par L nanotubes non magnétiques en s'appuyant sur l'interaction R_{KKY} . La température de compensation a été relevée. Puis, nous avons déduit d'après les susceptibilités thermiques deux pics correspondent au point d'inflexion voisin de la température de compensation et à la température de transition qui indique le passage entre la phase ferrimagnétique et paramagnétique. Les résultats obtenus indiquent que la température de compensation diminue en augmentant le nombre de nanotubes non magnétiques et le couplage des spins dans la partie 'shell'.

Nous envisageons dans l'avenir :

- Compléter la présente étude par la détermination d'autres paramètres qui peuvent influencer la T_{comp} et la T_r .
- Examiner autres propriétés à savoir: Diélectriques: (Polarisation, champ et susceptibilité électriques...) et thermodynamiques: Entropie, Enthalpie ...
- Mener une étude théorique de simulation par la méthode Monte Carlo et par DFT (Théorie de la fonctionnelle de la densité).

- Etudier des matériaux et alliages pour le stockage électronique de l'information.
- Examiner les propriétés magnétiques, électriques et optiques de nanomatériaux utilisés en nanotechnologies.

RÉFÉRENCES

- [1] E. M. Purcell and D. J. Morin, *Electricity and Magnetism*, Cambridge University Press, (2013).
- [2] S. M. Walker, *Magnetism*, Lerner Publications, (2005).
- [3] H. Brune, H. Ernst, A. Grunwald, W. Grunwald, W. Hofmann and H. Krug, *Nanotechnology: assessment and perspectives*, Springer Science Business Media, (2006).
- [4] M. Verdaguer, *Encyclopedia of Materials: Science and Technology (Second Edition)*, (2010) 1-9.
- [5] D. Gatteschi, R. Sessoli, A. Cornia, *Comprehensive Coordination Chemistry II*, Pergamon, 2 (2003) 393-419.
- [6] D. Gatteschi, R. Sessoli, A. Cornia, *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, Elsevier, 2015.
- [7] W. H. Wang, *Progress in Materials Science*, 57 (2012) 487-656.
- [8] F. Mazaleyrat. *Matériaux magnétiques: "Les nouveaux matériaux"*. Thèse de doctorat, École d'ingénieur. Supélec, Gif-sur-Yvette, France, (1999).
- [9] R. Khalladi, *Etude des Propriétés magnétiques des composés intermétalliques: Par les méthodes numériques : Ab-initio et Monte Carlo*. Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences de Rabat (2019).
- [10] Z. Fadil, *Eudes des propriétés magnétiques et diélectriques des nanomatériaux en vue de leurs applications en nanotechnologie : Simulation de Monte Carlo*. Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences de Rabat (2020).
- [11] D. P. Landau et K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, (2009).
- [12] M. E. J. Newman et G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statical Physics*, Oxford University press, (2002).

- [13] M. J. Bojan, and W. A. Steele, Chapter Four - Monte Carlo and Molecular Dynamics, Adsorption by Carbons, Elsevier, (2008) 77-101.
- [14] J.P. Doucet, and J. Weber, 6 - Monte Carlo and molecular dynamics simulations, Computer-Aided Molecular Design, Academic Press, (1996) 171-196.
- [15] J. Daujat, Origines et formation de la théorie des phénomènes électriques et magnétiques, Hermann, (1945) 530.
- [16] M. Getzlaff, Fundamentals of Magnetism, Springer, (2008). ISBN 978-3-540-31152-2
- [17] B. Kastler, D. Vetter, Chapitre 2 - Le phénomène de résonance magnétique, Editor(s): Bruno Kastler, Daniel Vetter, Comprendre L'irm (Huitième Édition), Elsevier Masson, (2018), 5-19.
- [18] O. Acher, Comptes Rendus Physique, 10 (2009), 423-436.
- [19] W. Nolting, and A. Ramakanth, Quantum Theory of Magnetism, Springer, (2009).
- [20] R. Mahadevan, R. Narayan et I. Yi, Astrophysical Journal, 465 (1996) 327–337.
- [21] D. D. Stancil, Springer, (1993). ISBN 978-1-4613-9338-2.
- [22] L. Pitre, D. M. Plimmer, F. Sparasci, and M. E. Himbert, Determinations of the Boltzmann constant, Comptes Rendus Physique, 22 (2019) 129-139.
- [23] C. P. Bean, and J. D. Livingston, Journal of Applied Physics 30, (1959) 120
- [24] M. Knobel, W. C. Nunes, L. M. Socolovsky, E. De Biasi, J. M. Vargas, J.C. Denardin, Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 8 (2008) 2836-285.
- [25] P. Weiss. L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. Journal de Physique Théorique et Appliquée, 6 (1907) 661-690.
- [26] Bernard Barbara, Comptes Rendus Physique, 20 (2019) 631-649,
- [27] G. Winkler, Magnetic Garnets. Vieweg, Braunschweig 5 (1981)
- [28] J. S. Galsin, Chapter 20 - Antiferromagnetism and Ferrimagnetism, Solid State Physics, Academic Press, (2019) 431-443.
- [29] C. W. Chen, CHAPTER 2- FERROMAGNETISM AND FERRIMAGNETISM, Magnetism and Metallurgy of Soft Magnetic Materials, Elsevier, (1977) 15-60.

- [30] D. Givord, and T. Takabatake, Magnetic Order, Reference Module in Materials Science and Materials Engineering, Elsevier, (2016). ISBN 9780128035818.
- [31] I. Turek, Ab Initio Calculations of Curie Temperatures, Editor(s): K.H. Jürgen Buschow, Robert W. Cahn, Merton C. Flemings, Bernhard Ilshner, Edward J. Kramer, Subhash Mahajan, Patrick Veyssièrè, Encyclopedia of Materials: Science and Technology, Elsevier,(2008) 1-6,
- [32] A.V. Svalov, G.V. Kurlyandskaya, V.O. Vas'kovskiy, A. Larrañaga, R. Domingues Della Pace, and C.C. Plá Cid, Superlattices and Microstructures, 90 (2016)242-246.
- [33] M. Godoy, V. Souza Leite, and W. Figueiredo, Physical Review B, 69 (2004) 054428.
- [34] G.C. Hadjipanayis, Magnets: High-temperature, Editor(s): K.H. Jürgen Buschow, Robert W. Cahn, Merton C. Flemings, Bernhard Ilshner, Edward J. Kramer, Subhash Mahajan, Patrick Veyssièrè, Encyclopedia of Materials: Science and Technology, Elsevier (2001) 5114-5118.
- [35] A. Goldman, Modern ferrite technology, Springer, 2006.
- [36] H. E. Landsberg Advances in geophysics, Academic Press, 1965.
- [37] L. Néel, Annales de Physique, 3 (1948) 137.
- [38] G.Y. Lavanov, V.M. Kalita, I.M. Ivanova, and V.M. Loktev, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 416 (2016) 466-474.
- [39] N. Bergeard. Matériaux magnétiques pour l'étude de la dynamique de l'aimantation. Thèse de Doctorat, Science des matériaux, Université Paris Sud - Paris XI, 2010.
- [40] W. H. Meiklejohn, and C. P. Bean, Physical Review 105 (1957) 904
- [41] R. Skomski, Simple Model of Magnetism, Oxford University Press, (2008).
- [42] D. H. Everett, and W. I. Whitton, A general approach to hysteresis, Transactions of the Faraday society, 48 (1952).
- [43] T. Moriya. Physical Review, 120 (1960) 91.
- [44] B. John. Goodenough, Scholarpedia, Mechanical Engineering, University of Texas at Austin, USA, 3 (2008) 7382.

- [45] T. Sahdane, Propriétés magnétiques de nanomatériaux : Etude par la méthode Monte Carlo, Thèse d'Université Mohamed V, Rabat 3047 (2017).
- [46] M.A. Ruderman, and C. Kittel, *Physical Review*, 96 (1954) 99.
- [47] N. Ananikian, R. Artuso, and H. Poghosyan, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 503 (2018) 892-904.
- [48] J. Ricardo de Sousa, I. G. Araújo, J. A. Plascak, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 278 (2000) 181-187.
- [49] P. Pfeuty, *Annals of Physics*, 57 (1970) 79.
- [50] E. Ising, Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift Für Physik*, 31,(1924) 253–258.
- [51] G. Gallavotti, “Classical Statistical mechanics, Texts and Monographs in Physics”, Berlin: Springer-Verlag (1999).
- [52] L. Onsager, *Physical Review Journal*, 65 (1944) 117.
- [53] B. A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis*, World Scientific, (2004).
- [54] J.B. Santos-Filho, J.A. Plascak, D.P. Landau, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 389 (2010) 2934-2938,
- [55] C. Holm, W. Janke, T. Matsui, and K. Sakakibara, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 246 (1997) 633-645,
- [56] F. Azizi, H. Rezaia, *Chinese Journal of Physics*, 59 (2019) 410-417,
- [57] X. Huang, Y. Song, and Y. Sun, *Physics Letters A*, 384 (2020)126474,
- [58] N. Flocke, and J. Karwowski, Chapter 19 - Symmetric group approach to the theory of Heisenberg lattices, *Theoretical and Computational Chemistry*, Elsevier, 10 (2002) 603-634,
- [59] T. Schneider, and E. Stoll, Chapter 4 - Spin Dynamics of Heisenberg Chains, *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*, Elsevier, 17 (1986) 129-240,
- [60] M. Blume, V. J. Emery and R. B. Griffiths, *Physical Review A*,4 (1971) 1071.

- [61] X. N. Wu, and F. Y. Wu, *Journal of Statistical Physics*, 50, (1988) 41–55.
- [62] F.Y. Wu, *Reviews of modern physics*, 54 (1982) 235.
- [63] R. J. Baxter, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6 (1973) 445.
- [64] R. Eckhardt, "Stan Ulam, John von Neumann, and the Monte Carlo method" (PDF). *Los Alamos Science*, No 15 (1987).
- [65] W. K. Hastings, *Biometrika*, 57 (1970) 97.
- [66] A. F. Smith, G. O. Roberts, *Journal of the Royal Statistical Society. Series B Methodological*, (1993) 3.
- [67] S. Zriouel, *Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone*, Thèse de Doctorat, Université Mohammed V, Rabat 2845 (2016).
- [68] A. Jinaphanh. *Etudes de la convergence d'un calcul Monte Carlo de criticité : utilisation d'un calcul déterministe et détection automatisée du transitoire*. Thèse de Doctorat, Université de Grenoble, (2012).
- [69] G. Terrée. *Méthode de Monte-Carlo et non-linéarités : de la physique du transfert radiatif à la cinétique des gaz*. Thèse de Doctorat, Génie des procédés. Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, (2015).
- [70] W. Krauth, *Statistical Mechanics Algorithms and Computations*, Oxford University Press, (2006).
- [71] K. Binder, *Introduction: Theory and Technical Aspects of Monte Carlo Simulations*. In *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Springer Berlin Heidelberg. (1986)
- [72] K. Hukushima, K. Nemoto, *Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations*. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65(6) (1996) 1604.
- [73] O. Breuleux, *Échantillonnage dynamique de champs markoviens*. Thèse de Doctorat, Faculté des arts et des sciences, Université de Montréal, 2009.
- [74] S. Ross, *Chapter 12 - Markov Chain Monte Carlo Methods*, *Simulation (Fifth Edition)*, Academic Press, (2013) 271-302
- [75] C. Andrieu, A. Doucet, and R. Holenstein, *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, 72 (2010) 269–342.

- [76] C. J. Geyer, *Statistical Science*, 7 (1992) 473-483
- [77] P. Brémaud. *Markov chains*, volume 31 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer-Verlag, Gibbs elds, Monte Carlo simulation, and queues, (1999).
- [78] G. S. Fishman, *Monte Carlo Concepts, Algorithms, and Applications*, Springer, (2013).
- [79] K. L. Chung, Second Edition. *Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Band 104*. Springer-Verlag New York, Inc., New York, (1967).
- [80] R. J. Glauber, *Journal of mathematical physics*, 4 (1963) 294.
- [81] D. P. Landau, and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2009.
- [82] R.Y. Rubinstein, and D. P. Kroese, *Simulation and the Monte Carlo method*, Wiley-Interscience, 2008
- [83] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller, *Journal of Chemical Physics*, 21 (1953) 1087,
- [84] S. Abriet, *Dynamique hors équilibre dans le modèle XY et la chaîne quantique d'Ising*, Thèse de Doctorat, l'Université Henri Poincaré, Nancy-I, (2004).
- [85] J. G. Amar, F. E. Sullivan, and R. D. Mountain, *Physical Review B*, 37 (1988) 196.
- [86] W. L. Dunn, and J. K. Shultis, 6 - *Markov Chain Monte Carlo, Exploring Monte Carlo Methods*, Elsevier, (2012) 133-169,
- [87] S. Theodoridis, Chapter 14 - *Monte Carlo Methods, Machine Learning (Second Edition)*, Academic Press, (2020) 731-769.
- [88] F. Korner-Nievergelt, T. Roth, S. von Felten, J. Guélat, B. Almasi, and P. Korner-Nievergelt, Chapter 12 - *Markov Chain Monte Carlo Simulation, Bayesian Data Analysis in Ecology Using Linear Models with R, BUGS, and STAN*, Academic Press, (2015) 197-212.
- [89] W. Wang, Z. Peng, S. Lin, Q. Li, D. Lv and S. Yang, *Superlattices and Microstructures*, 113 (2018) 178.
- [90] Z. L. Cui, L. F. Dong and C.C. Hao, *Materials Science and Engineering A286* (2000) 205.

- [91] I.J.L.Diaz and N.S. Branco, *Physica A*, 468 (2017) 158.
- [92] D. L. Leslie-Pelecky, and R. D. Rieke, *Chemistry of Materials*, 8 (1996) 1770.
- [93] R. Masrour and A. Jabar, *Superconductivity and Novel Magnetism*, 30 (2017)115.
- [94] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim and L. Bahmad, *Solid State Communication* 267(2017) 57.
- [95] I. J. L. Diaz and N.S. Branco, *Physica B : Condensed Matter* 529 (2018) 73.
- [96] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili, and L. Bahmad, *Superconductivity and Novel Magnetism*, 30 (2017)189.
- [97] T. Sahdane, A. Mhirech. L. Bahmad and B. Kabouchi, *Journal of Modern Physics B*, 31 (2017) 131.
- [98] R. Masrour. A. Jabar. L.Bahmad. M.Hamedoun and A.Benyoussef, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 421 (2017) 76.
- [99] M. Keskin and M. Ertaş, *Physical Review E*, 80 (2009) 061140.
- [100] R .Masrour and A. Jabar, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 497 (2018) 211.
- [101] W. Jiang, Y.Y. Yang and A.B. Guo, *Carbon*, 95 (2015) 190.
- [102] N. Lupu, M. Lostun and H. Chiriac, *Journal of Applied Physics*, 107(2010) 315.
- [103] Y.Yang, W. Wang Dan Lv, J.P. Liu, Zhong-yue Gao, and Z.Y. Wang, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 416 (2018) 101.
- [104] Y. M. Hao, S. Y. Lou, S.M. Zhou, R.J. Yuan., G. Y. Zhu and N. Li, *Nanoscale Research Letters*, 7 (2012) 100.
- [105] J. Strecka, *PhysicaA: Statistical Mechanics and its Applications*, 360(2006)379.
- [106] W. Jiang, Y. N. Wang, A. B. Guo, Y.Y. Yang and K. L. Shi, *Carbon*, 110 (2016) 41.
- [107] W. Wang,Y. Liu, Z.v. Gao, X. R. Zhao, Y. Yang, and S. Yang, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 101 (2018) 124.
- [108] N. De La Espriella, C. A. Mercado and J. C. Madera, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 401 (2016) 21.
- [109] A. Belhaj, A. Jabar, H. Labrim, S. Ziti, L. Bahmad, L.Laânab and A. Benyoussef, *Solid State Communications*, 266 (2016) 54.

- [110] K. H. Mohamad, *Solid State Communications*, 312 (2020) 113894.
- [111] Z. Zhen and H. Zhu, *Graphene*, 1 (2018) 12.
- [112] H. Sun, S. Mukherjee, Z. Shi and C. V. Singh, *Carbon*, 148 (2019) 752-761.
- [113] L. Wei, G.L. Liu, D. Z Fan and G.Y .Zhang, *Physica B: Condensed Matter*, 545 (2018) 99–106.
- [114] K. Kakaei, M. D .Esrafil and A. Ehsan, *Interface Science and Technology*, 27 (2019) 303-337.
- [115] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili, and L. Bahmad, *Superlattices and Microstructures*, 117 (2018) 382–391.
- [116] C. Wu, K. L Shi, Y. Zhang, W. Jiang, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 465 (2018) 114-12.
- [117] J. M. Wang, W. Jiang, C.L. Zhou, Z. Shi, and C. Wu. *Superlattices and Microstructures*, 102 (2017) 359-372.
- [118] Z. M. Lu, N. Si, Y.N. Wang, F. Zhang, J. Meng, H.L. Miao, and W. Jiang, *Physica A*, 523 (2019) 438-456.
- [119] K. W. Lee and C. E. Lee, *Current Applied Physics*, 19 (2019) 137-142.
- [120] K. L. Shi and W. Jiang, *Physica E*, 101 (2018) 94-102.
- [121] S. S. Lee and C. W. Zhang, *Materials Chemistry and Physics*, 173 (2016) 246-254.
- [122] W. An, Y. Zhang, X. Zhang, K. Li, Y. Kang and L. Gao, *Experimental Eye Research*, 174 (2018) 59–69.
- [123] J. Park, Y. S. Cho, S. J. Sung, M. Byeon, S. J. Yang, and C.R. Park *Energy Storage Materials*, 14 (2018) 8–21.
- [124] J. Y. Lim, N. M. Mubarak, E. C. Abdullah, S. Nizamuddin and M. Khalid, *Industrial Engineering Chemistry*, 66 (2018) 29-44.
- [125] S. Ren, P. Rong and Q. Yu, *Ceramics International*, 44 (2018) 11940–11955.

- [126] V. Nagarajan and R. Chandiramouli, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1105 (2017) 52–60.
- [127] R.Y. Guo, T. Li, S. E Shi and T. H Li, *Materials Chemistry and Physics*, 198 (2017) 346–353.
- [128] Z. Pang, X. Qian, Y. Wei and R. Yang, *EuroPhysics Letters*, 116 (2016) 36001.
- [129] S. Sadeghzadeh, *Superlattices and Microstructures*, 111 (2017) 1145–1161.
- [130] S. Sadeghzadeh and M. M. khatibi, *Superlattices and Microstructures*, 117 (2018) 271–282.
- [131] J. S. Gaffney, N. A. Marley, *General Chemistry for Engineers*, book, (2018) 41-73.
- [132] P. Bazylewski and G. Fanchini, *Comprehensive Nanoscience and Nanotechnology*, 1 (2019) 287-304.
- [133] N. Si, F. Zhang, W. Jiang and Y.L. Zhang, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 510 (2018) 641–648.
- [134] W. L. Li, Y. F. Zhao, H. S. Hu and J. Li, *Angewandte Chemie International Edition*, 53 (2014), 5540–5545.
- [135] W. L. Li, Q. Chen, W. J. Tian and H. Bai, *American Chemical Society*, 136 (2014) 12257–12260.
- [136] C. S. Liu, X. Wang, X. J. Ye and X. Yan, *Chemical Physics*, 141 (2014) 194306.
- [137] Z. A. Piazza, H. S Hu, W. L. Li and Y. F. Zhao, *Nature Communications*, 5 (2014) 3113.
- [138] A. Omidvar. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1115 (2017) 179–184.
- [139] K. Shi, W. Jiang, A. Guo, K. Wang, and C. Wu, *Physica A*, 500 (2018) 11-22.
- [140] A. J. Mannix, X. F. Zhou, B. Kiraly and J. D. Wood, *Science*, 350 (2015) 1513–1516.
- [141] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, and W. Li, *Nature Chemistry*, 8 (2016) 563–568.
- [142] W. W. Luo, G. Li, X. Wang, X. L. Lei, C. Y. Ouyang, and S.Q. Liu, *Physica B: Condensed Matter*, 537(2018) 1–6.
- [143] B. Mortazavi, O. Rahaman, A. Dianat and T. Rabczuk, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18 (2016) 27405–27413.
- [144] W. Li, L. Kong, C. Chen, J. Gou, S. Sheng, et al. *Science Bulletin*, 63 (2018) 282–286.
- [145] Z. Zhang, Y. Yang, E. S. Penev and B. I. Yakobson, *Advanced Functional Materials*, 27 (2017) 1605059.

- [146] J. Yuan, L. Zhang and K.M. Liew, *Computational Materials Science*, 133 (2017) 130–136.
- [147] N. Gao, X. Wu, K. Jiang, Y. Bai, and J. Zhao, *Flat Chemistry*, 7(2018) 48–54.
- [148] B. Mortazavi, M. Q. Le, T. Rabczuk, and L. F. C. Pereira, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 93 (2017) 202–207.
- [149] Z. F. Zhang, P. F. Wu, S. L. Gao, Zhang, et al. *ACS Applied Materials and Interfaces*, 8 (2016), 22175–22181.
- [150] H. Jiang, Z. Lu, M. Wu, F. Ciucci, et al. *Nano Energy*, 23 (2016) 97–104.
- [151] J. W. Jiang, X. C. Wang, Y. Song, and W. B. Mi, *Applied Surface Science*, 440 (2018) 42–46.
- [152] M. Shahrokhi, *Computational Materials Science*, 156 (2019) 56–66.
- [153] M. Makaremi, B. Mortazavi, and C.V. Singh, *Materials Today Energy*, 8 (2018) 22–28.
- [154] E. S. Penev, A. Kutana and B. I. Yakobson, *Nano letters*.16 (2016) 2522–2526.
- [155] M. Gao, Q.Z. Li, X.W. Yan and J. Wang, *Physical Review B*, 95 (2017) 024505.
- [156] L. Li, H. Zhang and X. Cheng, *Computational Materials Science*, 137 (2017) 119–124.
- [157] S. Idrissi, R. Khalladi, S. Mtougui, S. Ziti, H. Labrim, I. El Housni, N. El Mekkaoui, L. Bahmad, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 523 (2019) 714-722.
- [158] M. Qajjour, N. Maaouni, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*.482 (2019) 312-316. Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Physica B: Condensed Matter*, 564 (2019) 104-113
- [159] W. Jiang, J. Q. Huang, *Physica E* 78 (2016) 115-122.
- [160] S. Aouini, A. Mhirech, A. Alaoui-Ismaili and L. Bahmad, *Chinese Journal of Physics*, 56 (2018) 1640–1647.
- [161] W. Jiang, Y. N. Wang, A. B. Guo, Y. Y. Yang and K. L. Shi, *Carbon*, 110 (2016) 41-47.
- [162] K. Wang, P. Yin, Y. Zhang and W. Jiang, *Physica A*, 505 (2018) 268-279.
- [163] C. L. Zou, D. Q. Guo, F. Zhang, J. Meng, H. L. Miao and W. Jiang, *Physica E*, 104 (2018) 138-145.
- [164] D. J. Late, A. Bhat, and C. S. Rout. *Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, Fundamentals and Sensing Applications of 2D Materials*, Woodhead Publishing, (2019) 5-24.

- [165] J. Yang, X. Shen, C. Wang, Y. Chai, and H. Yao, *Extreme Mechanics Letters*, 29 (2019) 100473.
- [166] S. Li, L. Ma, M. Zhou, Y. Li, Y. Xia, X. Fan, C. Cheng, and H. Luo, *Current Opinion in Biomedical Engineering*, 13 (2020) 32-41.
- [167] D. Akinwande, C. J. Brennan, J. S. Bunch, P. Egberts, J. R. Felts, & al. *Extreme Mechanics Letters*, 13 (2017) 42-77.
- [168] P. V. Shinde, and M. K. Singh. *Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, Fundamentals and Sensing Applications of 2D Materials*, Woodhead Publishing, (2019) 91-143.
- [169] G. Mancusi, F. Fabbrocino, L. Feo, and F. Fraternali, *Composites Part B: Engineering*, 112 (2017) 235-242.
- [170] S. Han, Q. Meng, Z. Qiu, A. Osman, R. Cai, Y. Yu, T. Liu, and S. Araby, *Polymer*, 184 (2019) 121884.
- [171] H. Li, S. Hu, S. Zhao, and C. Lan. *Chemical Physics Letters*, 749 (2020) 137404.
- [172] C. Ye, D. Chao, J. Shan, H. Li, K. Davey, and S.Z. Qiao. *Matter*, 2 (2020) 323-344.
- [173] H. Y. Hoh, B. N. Shivananju, C. M. Li, and Q. Bao. *Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, 2D Materials for Photonic and Optoelectronic Applications*, Woodhead Publishing (2020) 253-280.
- [174] R. Kumar, E. Joanni, R. K. Singh, D.P. Singh, and S. A. Moshkalev. *Progress in Energy and Combustion Science*, 67 (2018) 115-157.
- [175] W. Liu, M. T. Bryan, and Y. Xu. *Fundamentals and Applications Materials Today, Spintronic 2D Materials*, *Materials Today*, (2020) 1-24.
- [176] M. Z. Iqbal, N. A. Qureshi, and G. Hussain, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 457 (2018) 110-125.
- [177] K. Shi, W. Jiang, A. Guo, K. Wang, and C. Wu. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 500 (2018) 11-22.
- [178] R. Abadi, A. Jenabidehkordi, and T. Rabczuk. *Computational Materials Science*, 178 (2020) 109625.

- [179] Y. Yin, Y. Hu, C. Feng, S. Li, B.L. Li, and D. Li. *Physics Letters A*, 348 (2020) 126457.
- [180] B. Feng, O. Sugino, R. Y. Liu, J. Zhang, R. Yukawa, M. Kawamura, T. Iimori, H. Kim, Y. Hasegawa, H. Li, L. Chen, K. Wu, H. Kumigashira, F. Komori, T. C. Chiang, S. Meng, and I. Matsuda, *Physical Review Letters*, 118 (2017) 096401.
- [181] L. Zhou, L. Fox, M. Włodek, L. Islas, A. Slastanova, E. Robles, O. Bikondoa, R. Harniman, N. Fox, M. Cattelan, and W. H. Briscoe, *Carbon*, 136 (2018) 255-261.
- [182] Z. Tang, X. Li, T. Sun, S. Shen, X. Huixin, and J. Yang. *Microporous and Mesoporous Materials*, 272 (2018) 40-43.
- [183] J. Yuan, L.W. Zhang, and K.M. Liew, *Computational Materials Science*, 133 (2017) 130-136
- [184] N. Şarlı, and M. Keskin, *Chinese Journal of Physics*, 60 (2019) 502-509.
- [185] L. Wen, G. Li, L.M. Yang, H. Pan, and E. Ganz, *Materials Today Communications*, 24 (2020) 100914.
- [186] H. N. Motlagh, and G. Rezaei, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 445 (2018) 26-36.
- [187] Z. D. Vatansever, and E. Vatansever, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 432 (2017) 239-244.
- [188] J. D. Alzate-Cardona, E. Restrepo-Parra, and C.D. Acosta-Medina, *Materials Chemistry and Physics*, 213 (2018) 362-367.
- [189] Z.D. Vatansever, and E. Vatansever. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 432 (2017) 239-244.
- [190] N. Maaouni, M. Qajjour, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar. *Physica B: Condensed Matter*, 566 (2019) 63-70.
- [191] C. Zhu, M. Wang, T. J. Li, T. Lu, and L. K. Pan, *Ionics* 23 (2017) 2175
- [192] O. Morresi, A. Pedrielli, S. Beccara, R. Gabbrielli, N. M. Pugno, and S. Taioli, *Carbon*, 159 (2020) 512.

- [193] S. Dastjerdi, and B. Akgöz. *International Journal of Engineering Science*, 142 (2019)125.
- [194] S. Iijima. *Nature*, 354 (1991) 56.
- [195] L.W. Zhang, W.M. Ji and K.M. Liew. *Carbon*, 132 (2018) 232.
- [196] A. Koochi, A.S. Kazemi, A. Noghrehabadi, A. Yekrangi, and M. Abadyan, *Materials & Design*, 32 (2011) 2949.
- [197] A. Gangele, S. K. Garala, and A. K. Pandey, *International Journal of Mechanical Sciences* 146–147 (2018) 191.
- [198] B. Ram, and H. Mizuseki, *Carbon*, 158 (2020) 827.
- [199] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, *Superlattices and Microstructures*, 117 (2018) 382.
- [200] K. Kato, and S. Saito, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 43 (2011) 669.
- [201] W. Wang, Y. Liu, Z.y. Gao, X. R. Zhao, Y. Yang, and S. Yang, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 101 (2018) 110.
- [202] A. A. Silva, R. A. Pinheiro, A. C. Rodrigues, M. R. Baldan, V. J. Trava-Airoldi, and E. J. Corat, *Applied Surface Science*, 446 (2018) 201.
- [203] K. Shirasu, M. Asaoka, T. Miyazaki, G. Yamamoto and T. Hashida. *Materials Today Communications*, 21 (2019)100608.
- [204] A. Almagableh, M. A. Omari, and I. Sevostianov, *International Journal of Engineering Science*, 144 (2019) 103127.
- [205] S. D. Liang, *Physica B: Condensed Matter*, 352 (2004) 305.
- [206] J. Cui, X. Ren, H. Mei, X. Wang, J. Zhang, Z. Fan, W. Wang, H. Tohmyoh, and X. Mei, *Applied Surface Science*, 512 (2020) 145696.
- [207] P. Kanninen, B. Eriksson, F. Davodi, M. Emelie M. Buan, O. Sorsa, T. Kallio, and R. W. Lindström, *Electrochimica Acta*, 332 (2020)135384.

- [208] M. He, Z. Xu, D. Shang, X. Zhang, H. Zhang, D. Li, H. Jiang, E. Kauppinen and F. Ding, *Carbon*, 144 (2019) 147.
- [209] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Solid State Communications*, 316–317, (2020) 113944
- [210] S. Aouini, A. Mhirech, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, *Chinese Journal of Physics*, 59 (2019) 346-356.
- [211] L. B. Drissi, S. Zriouel, L. Bahmad, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 374 (2015) 639-646,
- [212] A. Feraoun, and M. Kerouad, *Computational Condensed Matter*, 16 (2018) 00297.
- [213] N. Maaouni, M. Qajjour, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Physica B: Condensed Matter*, 566 (2019) 63.
- [214] O. Canko, A. Erdinç, F. Taşkın, and M. Atiş, *Physics Letters A*, 375 (2011) 3547-3551,
- [215] M. Qajjour, N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, W. Ousi Benomar and L. Bahmad. *Chinese Journal of Physics*, 63 (2020) 36.
- [216] Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, *Physica B: Condensed Matter*, 564 (2019) 104.
- [217] M. Qajjour, N. Maaouni, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 482 (2019) 312.
- [218] N. Maaouni, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 468 (2018) 175.
- [219] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Chinese Journal of Physics*, (2020) 295.
- [220] Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 491 (2019) 165559.
- [221] N. Si, F. Zhang, W. Jiang and Y.L. Zhang, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 510 (2018) 641.
- [222] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, *Superlattices and Microstructures*, 134 (2019) 106224.

- [223] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, *Superlattices and Microstructures*, 135 (2019)106285.
- [224] N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Solid State Communications*, 321 (2020) 114047
- [225] K.L. Shi and W. Jiang. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 101 (2018) 94.
- [226]G. Kalkabay, A. Kozlovskiy, M. Zdorovets, D. Borgekov, E. Kaniukov, A. Shumskaya, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 489 (2019) 165436,
- [227] I. Pełech, R. Pełech, U. Narkiewicz, A. Kaczmarek, N. Guskos, G. Żołnierkiewicz, J. Typek, and P. Berczyński, *Materials Science and Engineering: B*, 254 (2020) 114507.
- [228] C. Wu, K. Le Shi, Y. Zhang, and W. Jiang, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 465 (2018) 114-121.
- [229] M. Chen, W. Li, A. Kumar, G. Li, M. E. Itkis, M. E. Wong, and E. Bekyarova, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 11 (2019) 19315–19323.
- [230] M. Zare, F. Parhizgar and R. Asgari, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 456 (2018) 307.
- [231] Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 491 (2019) 165559.
- [232] R. Masrour, A. Jabar, A. Benyoussef, M. Hamedoun, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 401 (2016) 695-699,
- [233] T. Balcerzak, K. Szałowski and M. Jaščur, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 452 (2018) 360.
- [234] T. Balcerzak, J.W. Tucker. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 278 (2004) 87.

PRODUCTION SCIENTIFIQUE

N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Solid State Communications*, 321 (2020) 114047

N. Maaouni, M. Qajjour, Z.Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Physica B: Condensed Matter*, 566 (2019) 63–70

N. Maaouni, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 468 (2018) 175.

Z. Fadil, **N. Maaouni**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Brazilian Journal of Physics* 50 (2020) 716–724

M. Qajjour, **N. Maaouni**, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Chinese Journal of Physics* 68 (2020) 930–939

T. Sahdane, M. Qajjour, **N. Maaouni**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Materials Today Communications*, 25 (2020) 101508

Z. Fadil, **N. Maaouni**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Phase Transitions*, 93 (2020) 561–572

Z. Fadil, **N. Maaouni**, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Physica B: Condensed Matter*, 578 (2020) 411852

M. Qajjour, **N. Maaouni**, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, *Chinese Journal of Physics*, 63 (2020)3 6–44

M. Qajjour, **N. Maaouni**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 482, (2019) 312–316

Z.Fadil, **N.Maaouni**, A.Mhirech, B.Kabouchi, L.Bahmad, W.Ousi Benomar, International Journal of Thermophysics, 0123456789, 42 (2021) 45



Compensation behavior of an anti-ferrimagnetic core-shell nanotube like-structure: Monte Carlo Study

N. Maaoui^{*}, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar

Laboratoire de la Matière Condensée et des Sciences Interdisciplinaires (LaMCSI), Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, P.O. Box 1014, Morocco

ARTICLE INFO

Communicated by: Aggari Riza

Keywords:
Nanotube
Core-shell
Magnetic properties
Monte Carlo simulations
Exchange coupling interactions
Compensation temperature
Anti-ferrimagnetic

ABSTRACT

In this work, we study the magnetic properties of a nanotube core-shell like-structure using Monte Carlo simulations. The system consists of an anti-ferrimagnetic hexagonal core-shell nanotube like-structure with mixed spins $s = 1$ in the core and $S = 3/2$ in the shell. We start by discussing the ground state phase diagrams corresponding to several physical parameters. Then the magnetizations and the susceptibilities have been analyzed. Besides, we explore the thermal magnetization behavior under the effect of the exchange coupling interactions. Furthermore, we investigate the existence of the compensation temperature resulting from the variation of the coupling coefficients. Finally, the variation of the total magnetization and total susceptibility as a function of the exchange coupling interactions and the crystal field has been discussed.

1. Introduction

Magnetic nanotubes are of great interest to researchers because of their special intrinsic properties and dimensional characteristics [1,2]. Carbon nanotubes (NTCs), as the fullerenes structures, constitute one of the allotropes of carbon [3,4]. Carbon nanotubes were discovered in 1991, by Sumio Iijima [5], as a minor side product in the synthesis of fullerenes. Of the three allotropic forms of carbon (graphite, diamond and fullerene), graphite is the most thermodynamically stable element. It generally consists of a stack of Graphene sheets linked by Van der Waals type bonds, and the Graphene sheet can be seen as a 2D mono layer of sp^2 hybridized carbons organized in hexagonal cycles [6–9]. As far as NTC is concerned, it comes in the form of a Graphene sheet, a wound on its own, describing a tubular geometry. Thus, from the 2D structure of the Graphene sheet, we obtain a NTC with a one-dimensional cylindrical structure (1D) [10–13]. If the NTC consists of a single Graphene sheet, it is called a single-sheet nanotube (SWNT, for Single Wall Nanotube or single wall nanotube), yet, if it consists of several layers, it is multi-wall nanotubes (MWNT, for Multi Wall Nanotubes or nanotubes multi-sheets). The single-walled carbon (SWCNT) nanotubes have diameters ranging from 0.4 to 6 nm. Or, the multi-walled (MWCNT) composed of many dense nanotubes; the space between each sheet is 0.34 nm, so its diameters can exceed many tens of nanometers [14–19]. Actually, it is well recognized that the core-shell

structure consists of a main particle (core) and a covering layer (shell), which typically has different properties than the single component material [20–22]. In fact, much attention has been dedicated to study the core-shell systems in many recent papers, all by using Monte Carlo technique Kerouad et al. have investigated the magnetic properties of a mixed spin Ising nanowire with inner core, inner core-shell and outer shell morphology [23]. Moreover, the magnetic and thermal properties of a core-shell Borophene structure have been studied by Monte Carlo Simulations [24]. On the other hand, Using EFT, Carko et al. [25] have investigated the crystal field dependence of the magnetic properties of a mixed spin 1/2 and spin 1 Ising nanotube, some characteristic phenomena are established such as the tri-critical points. Applying the MCS, in recent papers, the authors paid attention to the investigation of the magnetic and thermodynamic properties and relevant results were found such as the compensation and the blocking temperatures in such systems and showing the effect of the several physical parameters on multiple hysteresis loops [26–30].

In the present work, we study a system composed by a magnetic nanotube of type core shell like-structure, with mixed spins $s = 1$ (in the core) and $S = 3/2$ (in the shell). The system is studied by Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm. This paper is structured as follows: the model and method used are illustrated in section 2, the ground state phase diagrams are discussed in sub-section 3.1 and the Monte Carlo simulation details in sub-section 3.2. Finally, the

^{*} Corresponding author.

E-mail address: maasouri.n@gmail.com (N. Maaoui).

<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2020.114047>

Received 8 May 2020; Received in revised form 16 July 2020; Accepted 6 August 2020

Available online 18 August 2020

0038-1098/© 2020 Elsevier Ltd. All rights reserved.



Magnetic and thermal properties of a core-shell borophene structure: Monte Carlo study



N. Maaouini^{*}, M. Qajjour, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar

Laboratoire de la Matière Condensée et des Sciences Interdisciplinaires (LaMCSI), Faculty of Sciences, P.O.Box 3014, Mohammed V University of Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:
 Borophene structure
 Magnetic properties
 Monte Carlo simulation
 Exchange coupling interactions
 Compensation temperature
 Ferrimagnetic materials

ABSTRACT

In this work, we study the magnetic properties of a borophene core-shell structure with spins $\sigma = 5/2$ and $S = 3/2$, using Monte Carlo simulations. We start by discussing the ground state phase diagrams corresponding to several physical parameters. Then the magnetizations and the susceptibilities have been analyzed. Besides, we explore the thermal magnetization behavior under the effect of the reduced exchange coupling interactions. Furthermore, we investigate the presence of the compensation temperature induced by the presence of a core shell structure and resulted from the variation of the reduced coefficient coupling. Finally, the variation of the total magnetizations as a function of the reduced exchange coupling interactions, the crystal and the external field has been discussed.

1. Introduction

Recently, the Graphene-like materials have attracted enormous attentions due to their novel properties, such as high strength of the lattice, high electronic mobility [1] which allows to the electrons to move freely and thermal conductivity [2], also great potential applications in microelectronics, spintronics, and hydrogen storage materials [3–5].

In theory, a great process of nano-materials has been made to study their magnetic properties by the effective field theory (EFT) with correlations of the nanowires encapsulated in carbon nano-tubes describing hmg model with anisotropy [6,7]. Moreover, the effect of nano-system's size on the magnetic properties of such systems has been discussed by Zhao-Ming Lu et al. within (EFT) [8].

This material with a two-dimensional (2D) honeycomb-like carbon network has attracted significant interest since its discovery, leading to a boom in the development of 2D materials. There are stable 2D structures made of silicon, germanium and tin on the periodic table, and they are named silicene, germanene and stanene, respectively. Those monolayers structure exhibit honeycomb lattice have an excellent electrical conductivity [9,10].

Indeed, despite its many qualities that make Graphene a promising 2D system, Graphene remains a semi-metal (or zero-gap semiconductor), and until now there was no stable 2D material with a metallic nature [10–12]. But very recently, it has been theoretically shown that a sheet of thick boron Atomic, the borophene, would be

metallic with relatively high electron mobility ($6.6 \cdot 10^5 \text{ m.s}^{-1}$) [13–15], in addition, it would have optical transmittance values of up to 100% in the visible, which make it more transparent than Graphene [16–19]. The Boron is also close to the carbon and it has been predicted to form 2D allotropes as their neighbor on the periodic table. The boron-boron bond is almost as strong as the carbon-carbon bond which allow to its mechanical properties close to those of Graphene [20–22]. The first attempts to synthesize boron-based flat structures focused on small clusters, such as B_{20} , B_{24} and B_{36} [23–28], as the basis for an extended borophene structure in 2015 [29] then in 2016 [30]. The first sheets of borophene were synthesized on silver surfaces Ag (111) under ultra-high vacuum conditions by epitaxial [31]. Moreover, it would be super-stretchy and flexible, and should undergo stress-induced allotropic transitions [32–36]; it would have excellent conductivity electronics [35] which makes it a good candidate to be used as anode [37,38] or electrical contact [39], it would also have better optical conductivity than Graphene [40–42], and would even be super-conducting [43,44]. These results, together with the potential intrinsic properties of borophene, have generated considerable interest, especially for applications in the field of energy storage [45,46].

In this study, we have used the Monte Carlo simulations in order to investigate the behaviors of the total and partial magnetizations and susceptibilities of the borophene structure with spins $\sigma = 5/2$ and $S = 3/2$ in core and shell, respectively. Furthermore, the compensation temperature is deduced. Finally, the total magnetization as a function of the exchange coupling interactions, the crystal and the external

^{*} Corresponding author.

E-mail address: maouini.n@gmail.com (N. Maaouini).

<https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.05.002>

Received 21 March 2019; Received in revised form 25 April 2019; Accepted 3 May 2019

Available online 07 May 2019

0921-4526/ © 2019 Elsevier B.V. All rights reserved.



Research articles

The compensation temperature behavior in a diluted extended ferrimagnetic material structure

N. Maaoui, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad^{*}, W. Ousi Benomar

Laboratoire de Métrique Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSi), Faculty of Sciences, P.O. Box 1034, Mohamed V University in Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Ferrimagnetic materials
Magnetic properties
Monte Carlo simulations
Exchange coupling interaction
Compensation temperature
Dilution probability

ABSTRACT

In this work, we study the magnetic properties in a diluted ferrimagnetic materials structure, composed with three areas, by Monte Carlo simulations. The system consists of two non-equivalent types of atoms A and B, two arrangements ABA and BAB are considered. The dilution effect concerns only the B atoms. The ground state phase diagrams are reported. The effect of exchange coupling interactions on the compensation temperature is investigated. The obtained results show that the system presents a compensation temperature and different behaviors when varying the coupling parameters and the dilution probability.

1. Introduction

The interest in studies on ferrimagnetic materials has increased considerably in the last few decades [1–3], particularly due to a number of phenomena associated with these systems that present great potential for technological applications [3,4]. Since the discovery of ferrimagnetism, several theoretical models have been proposed to explain their magnetic behavior [2–5]. Essentially, in these models the ferrimagnetic is described as a combination of two or more magnetically coupled substructures, e. g. subsets of atoms within the system [6]. Each substructure may exhibit different thermal behaviors for its magnetization and the combination of these different behaviors may lead to the appearance of some interesting phenomena such as compensation points [7–9], i. e., temperatures below the critical point for which the total magnetization is zero while the individual substructures remain magnetically ordered. Initially, compensation effects were theoretically studied in bipartite lattices with different spin magnitudes in each sublattice [10–13]. In the latter case, systems are composed of stacked of two type atoms which have all same spin-1/2 with different magnetic properties and the antiferromagnetic couplings between adjacent atoms (A-B) has important technological applications such as in magneto-optical recordings [13–16], magnetoresistance, and the magnetocaloric effect [16–18]. Moreover, the role of dilution may be an important one, since pure systems are not very common in nature [18,19], and the controlled growth of non-homogeneous materials may allow for the selection of desired physical behavior [20,21].

In this work, we present a Monte Carlo simulation of the magnetic properties of an Ising spin-1/2 system composed of two non-equivalent

atoms A and B in ferrimagnetic materials stacked. We also consider the presence of site dilution in one of the kinds of atoms. The simulations are performed with metropolis algorithm. The model is presented in Section 2, the ground state phase diagrams are presented in Section 3.1, and the results of the effect of exchange interaction parameters and dilution are reported and analyzed in Section 3.2.

2. Theory and model

The studied system is a bi-atoms plan which it divided by 3 areas arranged in two different forms. The first arrangement is of a type ABA where A atoms are located in the first and the third positions, while B atoms are between them (in the second position, see Fig. 1a). The second arrangement which is the type BAB is similar to the first one unless the positions of atoms A and B are permuted (see Fig. 1b). The total number of spins is $N_{ABA} = (2xN_A) + N_B = (2x55) + 44 = 155$ spins for ABA configuration, idem, the total number of spins is equal to $N_{BAB} = (2xN_B) + N_A = (2x55) + 44 = 155$ spins concerning BAB configuration.

These arrangements ABA and BAB are studied in pure and diluted cases, in order to investigate the existence or absence of the compensation temperature, and to compare the results corresponding to the two structures.

In short, we kept the same number of spins, whatever the nature of the arrangement. All sites are occupied by an Ising spin-1/2, each spin is connected to the nearest neighbor spins with an exchange interaction coupling. To simplify, we take (± 1) as an Ising spin in the studied systems.

* Corresponding author.

E-mail address: bahmad@ir.ac.ma (L. Bahmad).<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.037>

Received 29 April 2018; Received in revised form 6 July 2018; Accepted 4 August 2018

Available online 05 August 2018

0304-6853/ © 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.



Magnetic Properties and Compensation Temperature in Tri-layer Graphyne-Like Structure: Monte Carlo Simulations

Z. Fadii¹ · N. Maaoui¹ · A. Mhirech¹ · B. Kabouchi¹ · L. Bahmad¹ · W. Ousi Benomar¹

Received: 5 December 2020 / Accepted: 13 January 2021

© The Author(s), under exclusive licence to Springer Science+Business Media, LLC part of Springer Nature 2021

Abstract

In this paper, we study the magnetic properties of a tri-layer graphyne-like structure using Blume-Capel Ising model. The studied system is composed by a mixed spins $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2$ and $\pm 1/2$ (in the plane B) and $S = \pm 2, \pm 1$ and 0 (in the plane A). The study is performed through Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm. Besides, we examine the effects of the exchange coupling interactions on the obtained compensation temperature. Additionally, we investigate the effects of the crystal and external magnetic fields on the partial and total magnetizations. The magnetic and thermal properties of the considerate system are largely affected by the exchange coupling interactions, the crystal and external magnetic fields.

Keywords Compensation temperature · Magnetic hysteresis cycles · Magnetic properties · Monte carlo simulations · Tri-layer graphyne-like structure

1 Introduction



Compensation Temperature Behavior in a Nanotube Core-Shell Structure with RKKY Interactions: Monte Carlo Simulations

Z. Fadil¹  · N. Maaouni¹ · A. Mhirech¹ · B. Kabouchi¹ · L. Bahmad¹ · W. Ousi Benomar¹

Received: 13 July 2020 / Accepted: 16 September 2020
© Sociedade Brasileira de Física 2020

Abstract

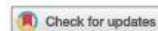
In this paper, we have studied the magnetic properties of the nanotube core-shell structure with RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) interactions, using Monte Carlo simulations (MCS). The system consists of hexagonal core-shell nanotube structure with mixed spins $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ (of the core) and $S = \pm 1, 0$ (of the shell), separated by non-magnetic nanotubes. Initially, we start this study by discussing for zero temperature, the ground-state phase diagrams in different planes. Moreover, we investigate for the positive temperature values, the effect of the RKKY interactions on the thermal magnetization and magnetic susceptibility of the system. Additionally, we study the effects of the exchange coupling interactions of the core and of the shell on the compensation and transition temperatures. Finally, we explore the behavior of the magnetic hysteresis cycles as a function of the non-magnetic nanotubes number, the temperature, and the exchange coupling parameters.

Keywords Nanotube core-shell structure · Magnetic properties · Compensation temperature · Transition temperature · Monte Carlo simulations · RKKY interactions · Magnetic hysteresis cycles

1 Introduction

The carbon element is located on the fourteenth column and the second period of the table of the elements [1, 2]. It therefore has six electrons, which can associate in three different ways called hybridizations. Only sp^2 hybridizations and sp^3 generate the forms of solid carbons allotropic. In the case of diamonds, carbon is sp^3 hybridized and each atom is linked to four other atoms in a tetrahedral arrangement [3, 4]. The four bonds σ give the diamond its hardness, its transparency, and its property of electrical insulation [5]. Graphene has sp^2 hybridization where each atom of carbon is linked to three other atoms in a planar pattern hexagonal [6]. In 1985, Smalley and his team highlight another allotropic form of carbon sp^2 hybrid: the C_{60} fullerene or “bucky ball” [7]. These molecules, composed of 60 atoms of carbon, have the rounded shape of a football unlike graphite composed of planes. This new organization of carbon atoms gave rise to the idea that a tubular

structure was also possible. It was Iijima in 1991 who was credited with the first observation of this new object called carbon nanotube (CNTs) [8]. The CNTs can be single-walled carbon (SWCNT) nanotubes having diameters between 0.4 and 6 nm [9–11]. Their lengths range from a few hundred nanometers to several micrometers depending on the methods of synthesis. Or they can be multi-walled (MWCNT) comprising of several concentrically interlinked nanotubes with space between each sheet 0.34 nm; their diameters can therefore reach several tens of nanometers [12–14]. In general, it is properly known that core-shell structure consists of a central particle (core) and a covering shell, which usually has different properties that the single component material does not have. The shell can change the surface charge density, functional groups, reactivity, biocompatibility, and stability of these composite structures [15–18]. In recent papers, the authors paid attention to the investigation of the magnetic properties using Monte Carlo simulations and relevant results were found such as the compensation temperature and the



Blume-Capel model of a nano-Stanene like structure with RKKY interactions: Monte Carlo simulations

Z. Fadil, N. Maaouni, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar

Faculty of Sciences, Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCScl), Mohammed V University, Rabat, Morocco

ABSTRACT

In this paper, the magnetic properties of a bi-layer nano-stanene like structure with RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) interactions have been studied using Monte Carlo simulations. The considered system is composed of two magnetic planes with mixed spins $\sigma = 7/2$ and $S = 1$, separated by the non-magnetic planes (L). Firstly, the ground state phase diagrams for zero temperature are reported and discussed. Secondly, for non-zero temperature, we examine the effect of the RKKY interactions on the magnetic properties of our system. It is found that the value of the blocking temperature increases when decreasing the number of the non-magnetic layers. Furthermore, the effect of the exchange coupling interactions on the blocking temperature behavior are investigated. Finally, the effect of several physical parameters on the hysteresis cycles have been determined.

ARTICLE HISTORY

Received 21 December 2019
Accepted 16 April 2020

KEYWORDS

Bi-layer nano-stanene like structure; magnetic properties; blocking temperature; phase diagrams; Monte Carlo simulations; RKKY interactions; magnetic hysteresis cycles

Highlights

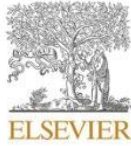
- We study the magnetic properties of bi-layer nano-stanene like separated by non-magnetic layers with RKKY interaction.
- The ground-state phase diagrams are presented and discussed.
- The magnetic properties of a bi-layer nano-stanene like structure using Monte Carlo simulations are investigated.
- The hysteresis cycles of a bi-layer nano-stanene like structure are analyzed.

1. Introduction

Recently, the Graphene-like materials have attracted enormous attention due to their novel properties, such as high strength of the lattice, high electronic mobility [1], which allows the electrons to move freely and thermal conductivity [2]. In addition, great potential applications in microelectronics, spintronics, and hydrogen storage materials have been found [3–6]. The Stanene (which means tin which gives us its chemical symbol Sn) [7] is the new cousin of graphene. This material with a two-dimensional (2D) has attracted a significant interest since its discovery, leading to a boom in the development of 2D materials [8,9]. One of its unique property is the high carrier mobility [10,11], which allows the electrons to freely move while experiencing low scattering from the defects and impurities [12]. The Stanene is a honeycomb-like monolayer of tin atoms. It may be a competitive candidate for graphene because of the high conductivity of stanene. Moreover, its electric

CONTACT Z. Fadil  fadilzakaria604@gmail.com

© 2020 Informa UK Limited, trading as Taylor & Francis Group



Magnetization and susceptibility behaviors in a bi-layer graphyne structure: A Monte Carlo study

Z. Fadil^{*}, N. Maaoui, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar

Laboratoire de la Matière Condensée et des Sciences Interdisciplinaires (LaMCS-I), Faculty of Sciences. P.O.Box 1014, Mohammed V University in Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Bi-layer graphyne structure
Magnetic properties
Monte Carlo simulations
Susceptibility
Transition temperature
Magnetic hysteresis cycles

ABSTRACT

In this paper, the magnetic properties of a bi-layer graphyne structure have been studied using Monte Carlo simulations. The considered system is composed of two planes of graphyne with mixed spins: $\sigma = 7/2$ and $S = 1$. Firstly, the ground state phase diagrams for zero temperature are reported and discussed. Secondly, the magnetic properties for the studied system are examined for non-zero temperature. The effects of exchange coupling interaction and temperature on magnetization, susceptibility and transitional temperature. Furthermore, the effects of the crystal field on total magnetization of the system have been exhibited. Finally, the effect of the ferrimagnetic parameter, temperature and crystal field on the hysteresis cycles have been determined. The obtained results have been compared with theoretical and experimental researches.

1. Introduction

Since 2004, graphenes have fascinated physicists for their remarkable properties [1]. These carbon sheets made of a single layer of atoms have a honeycomb structure and their very special electronic and mechanical characteristics make it a future material. Many researchers have shown that other carbon structures - which they call graphynes - might be even more interesting [2–5]. The Graphyne is a carbon-like two-dimensional structure also is a layer of carbon just one atom thick [6]. Additionally, graphyne has double and triple bonds and has no always a hexagonal symmetry. There are many numbers of double and triple bonded graphynes, but slightly distinct structures and arrangements [7]. Indeed, different kinds of graphynes are suggested by inserting triple carbon bonds (–CC–) into graphene C–C bonds, including three extremely symmetrical forms α -, β - and π -graphyne [8–10]. Moreover, graphynes have the same exceptional characteristics as Graphene, such as elevated carrier mobility, powerful mechanical characteristics and outstanding chemical and thermal characteristics [11–13]. Scientific models have shown that the conductive electrons of graphyne are traveling very quickly, as they do in graphene, but in just one direction [14,15]. In addition, bonding other transition metals can cause a narrow gap semi-conductor or a spin-polarized semi-conductor. While graphyne use is not yet prevalent, its characteristics are encouraging for a number of uses, including nanofillers, transistors and sensors [16,17]. Besides, the magnetic properties of different types of structure were

studied using the Monte Carlo simulations and that leads to interesting results, namely for a magnetic and thermal properties of a core-shell borophene structure [18], for a Lieb Nanolattice spin [19], in a diluted ferrimagnetic materials structure [20] and for a bilayer and trilayer nano-graphene structure [21,22].

In this work, we investigate a system constituted by a magnetic bi-layer graphyne structure, with half-integer $\sigma = 7/2$ and integer $S = 1$ spins. As far as we know, there is no investigations in the literature that have studied the bi-layer graphyne structure in the basis of the Monte Carlo simulations. Indeed, we study and deduce the ground state phase diagrams of the bi-layer graphyne structure in different physical parameter planes. In addition, the thermal behavior of both magnetization and susceptibility of the considered system is illustrated. Moreover, the dependency of total magnetization as a function of the crystal field of this graphyne structure is explored. To complete this study, the hysteresis cycles of the bi-layer graphyne structure are elaborated. The outline of this paper is organized as follows: the model and method used are illustrated in section 2, the ground state phase diagrams are discussed in sub-section 3.1 and the Monte Carlo simulation details in sub-section 3.2. Finally, the conclusion is given in section 4.

2. Model and method

The bi-layer graphyne structure is studied with free boundaries conditions. The system is composed by two magnetic plane, with spins

^{*} Corresponding author.

E-mail address: fadilzakaria604@gmail.com (Z. Fadil).

<https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.411852>

Received 13 June 2019; Received in revised form 31 October 2019; Accepted 4 November 2019

Available online 8 November 2019

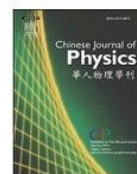
0921-4526/© 2019 Elsevier B.V. All rights reserved.



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Chinese Journal of Physics

journal homepage: www.sciencedirect.com/journal/chinese-journal-of-physics

Compensation behaviors in a tri-layers nano-dicoronylene like-structure with ferrimagnetic mixed spins (3/2,1): Monte Carlo study

M. Qajjour^{a,*}, N. Maaoui^a, Z. Fadil^a, A. Mhirech^a, B. Kabouchi^a, L. Bahmad^a,
W. Ousi Benomar^a

^a Laboratoire de la Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSel), Faculty of Sciences. P. O. Box 1014, Mohammed V University in Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Nano-dicoronylene
Monte carlo simulations
Compensation temperature
Blocking temperature
Hysteresis cycles

ABSTRACT

This paper outlines the magnetic properties of a tri-layers nano-dicoronylene like-structure, using Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm in the Blume Capel model. The top and bottom layers are composed by S-spins ($S = 0, \pm 1$), While the middle layer is composed by σ -spins ($\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$). Each layer contains 48 atoms. We establish, in six various planes, the ground state phase diagrams. Still, we present the thermal variation of partials and total magnetization and susceptibility for several values of exchange coupling interactions and crystal field. Also, the hysteresis cycles have been reported for selected values of temperature and exchange coupling interaction. The compensation and blocking temperatures values increases when increasing the exchange coupling parameter in the extreme layers.

1. Introduction

Currently, the developing interest in nanotechnology is focused on different nano-magnetic materials due to their exceptional magnetic properties. These materials exhibit very high surface reactivity and many interesting electric and magnetic properties [1-3]. In general, the surface properties give vigorous contributions to the magnetic properties, as a significant fraction of the atoms in the nanostructures existing at the surface [4-6]. Recent experimental realizations have been developed to explain the significant nanoparticles when decreasing the dimension of these materials. Nanostructured materials are classified as zero-dimensional, one dimensional, two dimensional, and three-dimensional nanostructures [7-14]. These materials are recognized by several properties, such as the compensation temperature, which is known in general as a method used to regulate system performances to compensate for properties caused by variations in temperature. Alternatively, among the parameters that have been explored by the researchers, we find the compensation temperature, which is also our objective in this study. Notably, in Ferromagnetic materials under certain conditions, at which the total magnetization vanishes [15-21]. As part of the exciting new research for the creation of a Bose-Einstein molecular condensate (BEC) opens the challenge of finding new states of quantum matter, several theoretical researchers have focused their research on the study of a nonlinear problems. They investigated matter-wave solitons in hybrid atomic-molecular Bose-Einstein condensates (BEC) with tunable interactions and external potentials. Also, they investigate the dynamical and energetic instabilities of

* Corresponding author.

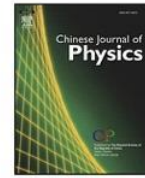
E-mail address: qajjour@gmail.com (M. Qajjour).

<https://doi.org/10.1016/j.cjph.2020.08.028>

Received 17 June 2020; Received in revised form 3 August 2020; Accepted 24 August 2020

Available online 14 November 2020

0577-9073/© 2020 The Physical Society of the Republic of China (Taiwan). Published by Elsevier B.V. All rights reserved.



Dilution effect on the compensation temperature in a honeycomb nano-lattice: Monte Carlo study



M. Qajjour*, N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, W. Ousi Benomar, L. Bahmad

Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSd), Faculty of Sciences, Mohammed V University of Rabat, P. O. Box 1014, Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Honeycomb nano-lattice
Monte Carlo simulations
Dilution concentration
Compensation temperature
Hysteresis loops
Exchange coupling parameters

ABSTRACT

In this work, we use Monte Carlo simulations with the Metropolis algorithm to study the dilution effect on the magnetic properties in a honeycomb nano-lattice. The geometry of the system is formed by two sub-lattices of $45 + 45 = 90$ atoms consisting of the spins $\sigma = 3/2$ and $S = 5/2$. The ground state phase diagrams at zero absolute temperature are presented. Also, the variation of the total magnetization with reduced temperature for several values of the reduced exchange coupling are discussed. It is found that the compensation temperature depends on the reduced exchange coupling parameters. Furthermore, the dilution of the S spins affects the compensation temperature and hysteresis loops of the studied system.

1. Introduction

Since its discovery, graphene continues to attract the interest of researchers from various perspectives [1] due to the peculiarity of its properties, whether it be the magnetic, electrical, mechanical or thermal properties [2–4]. The technological development in the electronics industry requires a search for new materials with better properties, especially, those with low size and weight [5–8]. Similarly, nano-graphene attracts more attention, even in civil engineering, owing to the fact that this material has some better mechanical properties than steel, like its density and strength [9]. Graphene is a two-dimensional honeycomb crystal, consisting of a single layer of carbon atoms [10]. Many theoretical and experimental studies about the magnetic properties of graphene have been done, using several methods. Wang et al. [11] have studied the nano-graphene bi-layer in a longitudinal magnetic field using Monte Carlo simulations. They have presented the effect of single-ion anisotropy and the intralayer exchange coupling on the magnetic properties of the nano-graphene. On the other hand, Guo et al. [12] have studied some magnetic properties of a doped graphene-like bi-layer, using the Heisenberg model, a Green's function and the linear spin-wave approximation. Other researchers have presented the magnetic properties of a bi-layer graphene structure with non-equivalent planes, using Monte Carlo simulations [13–17]. Despite the fact that it is still difficult to synthesize graphene, many other researchers have focused their works on the experimental aspects of its study [18–20]. Moreover, it is so important to study the dilution effect on the magnetic properties of the graphene, because the pure systems are not very common in nature [21,22].

In addition, recently there are many works reporting results for nano-structure systems, such as the bath room [23], borophene core-shell and Lieb structures [4].

We recall that in some of our earlier works, we have studied the dilution effect on the compensation temperature in a nano three

* Corresponding author.

E-mail address: qajjour@gmail.com (M. Qajjour).

<https://doi.org/10.1016/j.cjph.2019.09.038>

Received 9 February 2019; Received in revised form 14 June 2019; Accepted 18 September 2019

Available online 24 October 2019

0577-9073/ © 2019 The Physical Society of the Republic of China (Taiwan). Published by Elsevier B.V. All rights reserved.



Research articles

Dilution effect on the magnetic properties of the spin Lieb nanolattice: Monte Carlo simulations

M. Qajjour, N. Maaouni, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad^{*}, W. Ousi Benomar

Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSi), Faculty of Sciences, P. O. Box 1014, Mohammed V University in Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:
Spin Lieb nanolattice
Dilution
Monte Carlo simulation
Magnetization
Magnetic susceptibility
Magnetic hysteresis cycles

ABSTRACT

In this paper, we investigate the magnetic properties of the spin Lieb nanolattice for three sublattices with spins $S = 1/2$, $s = 3/2$ and $q = 1$, in the presence of sites dilution. Furthermore, in order to study the effect of disorder, the spins S and/or q are diluted, while the spin s stays pure. The work is carried out according to the Monte Carlo Simulations. We start this research by giving the total and partial magnetizations, then we present magnetic susceptibilities of the studied system. In addition, the variation of the magnetization with temperature of mixed spins (s , σ and q) with dilution is presented. The total magnetization with crystal and external fields and with dilution of mixed spins is obtained. Besides, we have presented the magnetic hysteresis cycles of spin Lieb structure, for different values of crystal-field and temperature and for different dilution values. To the best of our knowledge, no single research has been reported in the study of the dilution effect on the magnetic properties in the studied system.

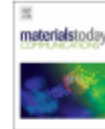
1. Introduction

In the last few decades, Lieb lattice has attracted enough attention from both theoretical and experimental point of view [1–3]. Researchers were interested in the study of physical properties of 2D Lieb nanolattice, owing to their important magnetic properties [4–6]. In general, Lieb lattice, like the majority of the nanomaterials, can be useful for several advanced technological applications. Particularly, where the main concern is to minimize, as much as possible, the size and weight of nanotechnologies. A good example is computer memory and optical disks [7–12]. Various works and researches have been done mainly in the study of physical properties of Lieb nanolattice. Using linear response theory and Green's function approach M. Yarmohammadi [13] has obtained the dynamical thermal conductivity (DTC), he has investigated the frequency dependence of thermal conductivity of the Lieb lattice. The (DTC) has been obtained in the context of Heisenberg Hamiltonian. J.D Gouveia and R.G Dias [14] have studied the mean field phase diagram of the two-dimensional Hubbard model in the Lieb lattice, they have showed that by admitting the system to modulate the magnetization and charge density between several sublattices, the gap of the magnetization of the sublattices is as predicted by Lieb. On the other hand, R. Massour and A. Jabar [15] have investigated the magnetic phase transitions and the ground state of the spin Lieb nanolattice. They have studied the behavior of the total

magnetization and susceptibility when varying the exchange interactions and crystal field. Similar studies [16–18], on the spins Lieb nanolattice and in the other analogous structures have been carried out by using Monte Carlo simulations, the authors have concentrated on the study of magnetic properties and the ground state. They have obtained the variation of total magnetization, total susceptibility and magnetic hysteresis cycles, for different values of exchange interaction and temperature. Furthermore, other researches have investigated the effect of dilution or disorder, in the nanomaterials, since pure systems are not available in nature [19,20].

In this work, we used the Monte Carlo (MC) method to numerically investigate some physical Lieb System properties. This method is an efficient tool to study the magnetic properties in statistical set [21–23]. Indeed, the MC is a powerful tool, which was used to simulate complex physical phenomena in various domains [23,24]. On the other hand, Chakrabarti and Acharyya [25] have studied the response of many-body system, under a time-dependent leading to many novel physical phenomena with intriguing physics and important technological applications. Several experimental researches have been established in the study of the spin Lieb lattice. Particularly, Guzman et al. [26] have analyzed the transport of light in the bulk and the edge of photonic Lieb lattices. They have found that transport in bulk Lieb lattices is significantly affected by particular excitation site within the unit cell. On the other hand, Diebel et al. [27] have experimentally shown wave

^{*} Corresponding author.E-mail address: lbahmad@univ.ac.ma (L. Bahmad).



Thermal and magnetic property behaviors of a binary alloy borophene structure: A Monte Carlo study

T. Sahdane, M. Qajjour, N. Maaoui*, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar

Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSi), Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, P. O. Box 1034, Morocco



ARTICLE INFO

Keywords:
 Borophene
 Binary alloy
 Concentration
 Magnetic properties
 Hysteresis cycles
 Compensation point
 Ferrimagnetic coupling

ABSTRACT

In this work, we investigate the magnetic properties of a binary alloy borophene structure of the form A_pB_{1-p} . The calculations were performed using the Monte Carlo method under the Metropolis algorithm. The studied borophene structure consists of atoms A of spin $S = 5/2$ with a concentration p and atoms B of spin $\sigma = 2$ with a concentration $1-p$. The Hamiltonian of the system includes the ferrimagnetic coupling between A and B atoms. The behavior of the total and partial magnetizations are explored for different values of the concentration p . In addition, under specific values of the physical parameters and the concentration p , we study the possibility of the appearance of the compensation point. Besides, The hysteresis cycles have been established and discussed.

1. Introduction

Allotropic 2D materials are the modern wilderness of materials science, due to their interesting strategic properties and application inside a few sciences. Allotropic 2D materials have performed tunable physical, chemical, biochemical, optical characteristics, and among the allotropic elements, graphene materials have been generally examined for their unique properties, which are profoundly required in various applications [1,7]. After the discovery of this smart and flexible material, the researchers have consolidated it into nanomaterial and nanotechnologies with potential applications for ingenious gadgets and other devices in many fields. The Borophene is a boron sheet whose thickness is that of a single atom. Like carbon-based graphene, its two-dimensional structure makes it a material of choice for future applications taking advantage of its remarkable electronic properties. But unlike graphene, which can be extracted from a sample of natural graphite, it cannot be found in natural form. [8–11]. Generally, 2D materials have remarkable physical properties that are appropriate for electronic devices. Moreover, their applications were found in a few modern innovations within the field of photonics, energy conversion, and also a great potential in spintronics [12–17].

The borophene is made with a distinctive strategy; actually, it is gotten through the physical vapor deposition (PVD) strategy, which works by vaporizing boron on a thin film of silver (Ag) [18–20]. In the periodic table of the elements, boron is a metalloid close to carbon and, like it, it occurs in many forms; the most common are amorphous boron, which looks like a black powder, and crystalline boron with a

hexagonal structure. Boron has a very particular atomic configuration, due to the presence of three external electrons. Its chemistry is exceptionally complicated: the boron atoms not only have strong covalent bonds in pairs, but also in triplets, which allows many configurations of boron crystals and explains their particular hardness, also authorities to its mechanical properties near to those of Graphene [21–23]. The primary endeavors to synthesize boron-based level structures centered on little clusters [24–27].

Recently, some specialists who are working on the thermic conductivity of borophene have appeared that it can be clarified since of its anisotropy. Though, compared to other comparable materials, the thermal properties of borophene are lower, due to the diffusion effect of its phonons [28–31]. The borophene surfaces are exceptionally distinctive from those observables on Graphene. Actually, borophene has edges with a morphology that obviously depends on how profound the boron molecules tie together. These structural characteristics make borophene a polymorphous and anisotropic substance [32–34].

On the other hand, the anisotropic optical properties detailed on borophene sheets are quite interesting, as they hold high optical transparency. Moreover, it would have optical transmittance values reaches to cent per cent in the visible, which makes it more straightforward than Graphene [35,36]. Scientists also informed that borophene has many worthy applications in batteries [37,38], Nano-superconducting, and biomedical devices [39–41]. All these results show that borophene can be a promising material for magnetism and especially for applications in energy storage [42].

There are many studies focus on borophene structure [43,45], but

* Corresponding author.

E-mail address: masaoui.n@gmail.com (N. Maaoui).