

CENTRE D'ETUDES DOCTORALES - SCIENCES ET TECHNOLOGIES

N° d'ordre : 3370

THÈSE DE DOCTORAT

Présentée par :

Zakaria FADIL

Discipline : Physique

Spécialité : Physique de la Matière Condensée

Titre :

**Eudes des propriétés magnétiques et diélectriques des nanomatériaux en
vue de leurs applications en nanotechnologie : Simulation de Monte Carlo**

Soutenue le 21/11/2020, devant le jury :

Hamid EZ-ZAHRAOUY	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Président
Abdelaziz MHIRECH	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Directeur de thèse
Bousselham KABOUCHI	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Co-Directeur de thèse
Lahoucine BAHMAD	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Rapporteur / Examineur
Abdelkader BOULEZHAR	PES, Faculté des Sciences, Université Hassan II-Casablanca	Rapporteur / Examineur
Mohamed DAOUD	PES, Faculté des Sciences, Université Ibn Tofail Kénitra	Rapporteur / Examineur
Wahib OUSI BENOMAR	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Rapporteur / Examineur

Remerciements

Les travaux exposés dans cette thèse ont été réalisés au sein du Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCScI) du département de physique de la Faculté des Sciences de Rabat (Responsable de la structure de recherche : Pr. **Hamid EZ-ZAHRAOUY**), sous la direction du Professeur **Abdelaziz MHIRECH** et la co-direction du Professeur **Bousselham KABOUCI**.

Je remercie tout d'abord Dieu tout puissant de m'avoir donné le courage, la force et la patience d'achever ce travail.

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

J'adresse, mes remerciements les plus chaleureux à mon Directeur de thèse, Monsieur **Abdelaziz MHIRECH**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour sa disponibilité, ses idées scientifiques, ses investissements dans ce travail de recherche et de l'aide qu'il a apportée pour l'avancement et l'aboutissement de cette thèse.

Mes sincères remerciements vont aussi à mon Co-Directeur et rapporteur de thèse, Monsieur **Bousselham KABOUCI**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour sa contribution et ses conseils précieux qui m'ont donné le courage et la confiance pour l'achèvement de ce travail de recherche.

Je remercie particulièrement, Monsieur **Hamid EZ-ZAHRAOUY**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, d'avoir accepté de présider le Jury de cette thèse.

Mes remerciements les plus profonds vont à Monsieur **Lahoucine BAHMAD**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour sa participation à mon jury de thèse en qualité de rapporteur et examinateur et pour toutes les remarques intéressantes qu'il m'a faites. Veuillez agréer, Monsieur, l'assurance de mon profond respect.

Je tiens à remercier, également, le rapporteur et examinateur de ce travail, Monsieur **Abdelkader BOULEZHAR**, Professeur à la Faculté des Sciences Aïn Chock de Casablanca, pour l'intérêt qu'il a témoigné à l'égard de mon travail.

Un grand merci à Monsieur **Mohamed DAOUD**, Professeur à la Faculté des Sciences de Kénitra, pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail de recherche et pour avoir accepté d'être rapporteur et examinateur de cette thèse.

Je remercie vivement Monsieur **Wahib OUSI BENOMAR**, Professeur à la Faculté des Sciences de Rabat, d'avoir accepté d'être rapporteur et examinateur de cette thèse et d'avoir participé à mon jury et je le remercie également pour sa sympathie et sa bonne humeur.

Un grand merci à mes parents pour leur soutien financier et moral constant et leur bienveillance sensationnelle, à mon frère et à toute ma famille de m'avoir toujours encouragé et soutenu durant la préparation de cette thèse.

Je remercie vivement tout le corps professoral qui a participé à ma formation.

Finalement, que tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'accomplissement de ce travail trouvent ici l'expression de mes remerciements.

Résumé

L'importance et la capacité des nanotechnologies à révolutionner l'informatique et l'électronique par la production de nouveaux matériels de plus en plus miniaturisés, nous a poussé à nous pencher sur la modélisation des nanomatériaux. Dans le présent travail, nous avons développé cet axe de recherche dans le but d'étudier les propriétés magnétiques (aimantations et susceptibilités) et diélectriques (polarisations et susceptibilités) de différentes nanostructures à savoir le graphène, le graphyne, la stanene, l'ovalene, la coronene, le naphthalène et le borophene. De telles nanostructures ont été traitées avec différentes morphologies notamment un, deux ou trois plans et avec différents arrangements de spins. Nous avons utilisé les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis dans le cadre du modèle de Blume Capel. En effet, nous avons d'abord commencé par traiter les diagrammes de phase des différentes nanostructures à l'état fondamental pour connaître les configurations de spins les plus stables. En outre, pour les températures non nulles, nous avons examiné l'effet des interactions de couplage entre spins et les interactions RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) sur les propriétés magnétiques et diélectriques dans nos nano-systèmes. Par ailleurs, une attention particulière a été portée aux différents paramètres physiques qui influencent les températures de compensation et de transition ainsi que les cycles d'hystérésis. En fait, les nanomatériaux étudiés dans cette thèse pourraient avoir un grand potentiel d'applications technologiques notamment dans les enregistrements magnéto-optiques, la spintronique, la magnétorésistance géante et les effets magnétocaloriques.

Mots-clefs : Nanomatériaux; Simulations de Monte Carlo; Graphene; Graphyne; Borophene; Stanene; Naphthalène; Ovalene; Coronene; Diagrammes de phases; Température de compensation; Température de transition; Modèle de Blume-Capel.

Abstract

The importance and the capacity of nanotechnologies to revolutionize computer science and electronics by the production of new increasingly miniaturized materials, has prompted us to look into the modeling of nanomaterials. In the present work, we have developed this line of research in order to study the magnetic (magnetizations and susceptibilities) and dielectric (polarizations and susceptibilities) properties of different nanostructures, namely stanene, graphene, graphyne, ovalene, coronene, naphthalene and borophene. Such nanostructures have been treated with different morphologies, in particular one, two or three planes and with different arrangements of spins. We used Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm as part of the Blume Capel model. Indeed, we first started by processing the phase diagrams of the different nanostructures in the ground state to know the most stable spin configurations. Additionally, for non-zero temperatures, we examined the effect of spin coupling interactions and RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) interactions on magnetic and dielectric properties in our nano-systems. Furthermore, special attention has been paid to the various physical parameters that influence the compensation and transition temperatures as well as the hysteresis cycles. In fact, the nanomaterials studied in this thesis could have a great potential for technological applications, particularly in magneto-optical recordings, spintronics, giant magnetoresistance and magnetocaloric effects.

Keywords: Nanomaterials; Monte Carlo simulations; Graphene; Graphyne; Borophene; Stanene; Naphthalene; Ovalene; Coronene; Phase diagrams; Compensation temperature; Transition temperature; Blume-Capel model.

Table des matières

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

CHAPITRE I : Propriétés magnétiques des matériaux, modèle et méthode de calcul

I.1 Introduction.....	4
I.2 Classifications magnétiques des matériaux	5
I.2.1 Diamagnétisme	6
I.2.2 Paramagnétisme	6
I.2.3 Ferromagnétisme	7
I.2.4 Antiferromagnétisme	7
I.2.5 Ferrimagnétisme	8
I.2.6 Anti-ferrimagnétisme	9
I.2.7 Super-paramagnétisme	9
I.3 Température de transition et de compensation.....	9
I.3.1 Température de Curie	10
I.3.2 Température de Néel	10
I.3.3 Température de blocage	10
I.3.4 Température de compensation	11
I.4. Classification des Transitions de phases	11
I.4.1 Classification d'Ehrenfest	11
I.4.2 Classification de Landau	12
I.5 Interactions magnétiques	13
I.5.1 Interaction de double-échange.....	13
I.5.2 Interaction de super-échange.....	14
I.5.3 Interaction RKKY	15
I.6 Anisotropies magnétiques	17
I.6.1 Anisotropie magnéto-cristalline.....	17
I.6.2 Anisotropie de forme (ou dipolaire)	17
I.6.3 Anisotropie de surface ou d'interface	18
I.6.4 Anisotropie d'échange	18
I.6.5 Anisotropie magnéto-élastique	19
I.7. Simulation de Monte Carlo	19
I.7.1. Introduction.....	19
I.7.2. Concept de la simulation Monte Carlo	19
I.8 Conditions aux bords.....	24
I.8.1 Conditions aux limites périodiques	24
I.8.2 Conditions aux limites périodiques vis.....	25

I.8.3 Conditions aux limites de bord libre	25
I.9. Modèles de Spin	26
I.9.1 Modèle d'Ising.....	26
I.9.2 Modèle de Potts	27
I.9.3 Modèle de Blume-Capel	27
I.9.4 Modèle de Blume-Emery-Griffiths.....	28
I.9.5 Modèle XY	29
I.9.6 Modèle d'Heisenberg	29
I.10 Algorithme de Simulation	30
I.10.1 Algorithme de Metropolis	30
I.10.2 Algorithme de Wolff	35
I.10.3 Algorithme de Swendsen-Wang.....	36
I.10.4 Algorithme de Niedermayer.....	37
I.11 Equilibre et grandeurs physiques.....	39
I.11.1 Introduction.....	39
I.11.2 Equilibre	39
I.11.3 Grandeurs physiques.....	39
I.12 Propriétés hystérétiques	41
I.12.1 Structure des domaines magnétiques.....	41
I.12.2 Cycles d'hystérésis	45
I.12.3 Paramètres caractéristiques des cycles d'hystérésis.....	46
I.12.4 Matériaux magnétiques durs et doux.....	48
I.13 Conclusion	50
CHAPITRE II : Etude par le modèle de Blume-Capel des nanostructures de type graphyne, stanene et naphthalène par l'interaction RKKY : Simulations de Monte Carlo	
II.1 Modèle de Blume-Capel appliqué à une structure graphyne bicouche avec l'interaction RKKY : simulations Monte Carlo	52
II.1.1 Introduction	52
II.1.2 Présentation du système et de l'hamiltonien.....	52
II.1.3 Résultats et discussion.....	54
II.1.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental.....	54
II.1.3.2 Simulations Monte Carlo	56
II.2 Modèle de Blume-Capel d'une structure de type nano-stanene par l'interaction RKKY : simulations de Monte Carlo.....	62
II.2.1 Introduction	62
II.2.2 Présentation du système et de l'hamiltonien.....	62
II.2.3 Résultats et discussion.....	64

II.2.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental.....	64
II.2.3.2 Simulations Monte Carlo.....	66
II.3 Propriétés magnétiques d'une nanostructure de type naphthalène en présence de l'interaction RKKY : Simulations de Monte Carlo.....	73
II.3.1 Introduction.....	73
II.3.2 Présentation du système et de l'hamiltonien.....	74
II.3.3 Résultats et discussion.....	75
II.3.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental.....	75
II.3.3.2 Simulations Monte Carlo.....	80
II.4 Conclusion.....	90
CHAPITRE III : Température de compensation dans les structures graphène, borophene ovalène et naphthalène : Simulations de Monte Carlo	
III. 1 : Effets de dilution sur la température de compensation dans la structure nano-graphène à trois plans : Simulations Monte Carlo.....	92
III.1.1 Introduction.....	92
III.1.2 Présentation du nano-système et de l'hamiltonien correspondant.....	93
III.1.3 Résultats et discussion	94
III.1.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental	94
III.1.3.2 Simulations Monte Carlo	95
III.2 Effets de la dilution sur la température de compensation dans la structure cœur-coquille du borophene : simulations de Monte Carlo	104
III.2.1 Introduction.....	104
III.2.2 Présentation du système et de l'hamiltonien	104
III.2.3 Résultats et discussion	106
III.2.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental	106
III.2.3.2 Simulations Monte Carlo	110
III.3 Comportements de l'aimantation et de la compensation dans la nano-structure d'ovalène anti-ferrimagnétique à spins mixtes (7/2, 1).....	117
III.3.1 Introduction.....	117
III.3.2 Modèle, hamiltonien et présentation du nano-système	117
III.3.3 Résultats et discussion	118
III.3.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental	118
III.3.3.2 Simulations Monte Carlo	122
III.4 Propriétés diélectriques et comportements de compensation d'une monocouche nano-île de type naphthalène : Simulations de Monte Carlo	131
III.4.1 Introduction.....	131
III.4.2 Présentation du système et de l'hamiltonien	132
III.4.3 Résultats et discussion	133

III.4.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental	133
III.4.3.2 Simulations Monte Carlo	138
III.5 Conclusion	146
CHAPITRE IV : Le comportement de la température de transition dans les structures de graphyne monocouche et bicouche et dans la structure de coronene monocouche : Simulations de Monte Carlo	
IV.1 : Comportements de l'aimantation et de la susceptibilité dans une structure de graphyne bicouche : Simulations Monte Carlo.....	148
IV.1.1 Introduction.....	148
IV.1.2 Présentation du nano-système et de l'hamiltonien correspondant.....	149
IV.1.3 Résultats et discussions.....	150
IV.1.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental	150
IV.1.3.2 Simulations Monte Carlo.....	154
IV.2. Propriétés diélectriques d'une structure monocouche de nano-graphyne : Simulations de Monte Carlo	159
IV.2.1 Introduction.....	159
IV.2.2 Présentation du système et de l'hamiltonien	159
IV.2.3 Résultats et discussion	160
IV.2.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental	161
IV.2.3.2 Simulations Monte Carlo.....	161
IV.3: Polarisation et susceptibilité diélectrique d'une nanostructure monocouche de type coronene : Etude par Simulations Monte Carlo	169
IV.3.1 Introduction.....	169
IV.3.2 Présentation du système et de l'hamiltonien	169
IV.3.3 Résultats et discussion	171
IV.3.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental	171
IV.3.3.2 Simulations Monte Carlo.....	175
IV.4 Conclusion	184
Conclusion générale et perspectives.....	185
Références	187
Liste des publications	200

Introduction générale

Les propriétés magnétiques des matériaux jouent un rôle majeur dans les machines électriques (moteurs électriques, génératrices, transformateurs) et le stockage de l'information (bandes et pistes magnétiques, disques durs). Le magnétisme est donc d'une grande importance dans le domaine de la physique. L'origine du comportement magnétique provient du fait qu'une charge électrique en mouvement (le spin et le mouvement orbital des électrons) engendre un champ magnétique autour d'elle-même. Les électrons peuvent former de petits dipôles magnétiques capables de réagir à un champ magnétique extérieur appliqué. Un aimant contient deux pôles : un pôle nord et un pôle sud. Les lignes de champ magnétique émergent du pôle nord pour converger au pôle sud. La puissance d'un champ magnétique H , qui mesure la magnitude et la direction du champ, détermine la force agissant sur les dipôles magnétiques. Si toutes les couches électroniques d'un atome sont remplies, la somme de ces courants est nulle et cet atome n'aura aucun moment magnétique résultant. Il sera insensible à un champ magnétique externe et fera partie des matériaux diamagnétiques [1-3]. Les atomes comportant un seul électron sur la couche externe sont faiblement sensibles à un champ magnétique externe. Ils font partie des matériaux paramagnétiques [4-6]. À l'état solide, seuls les éléments ayant une couche interne incomplète auront une forte sensibilité à un champ magnétique externe. Ils constituent la famille des matériaux ferromagnétiques [7] ou des matériaux ferrimagnétiques qui se composent en deux ou plusieurs sous-réseaux magnétiques avec des spins non égaux [8,9]. En outre, au début, seuls les matériaux dans un état massif étaient considérés. Mais grâce aux nouvelles méthodes de fabrication, de nouvelles formes de matériaux ont vu naissances, commençant par les couches minces, puis ultra-minces et en arrivant aux nanofils [10], nanotubes [11], nanorubans [12] et nanoparticules [13]. En effet, les propriétés magnétiques des matériaux ont des potentiels d'applications dans plusieurs domaines, comme dans les supports d'enregistrement magnétique [14,15]. D'autre part, les nanotechnologies [16] bénéficient de plusieurs milliards de dollars en recherche et développement dans le monde. Ces nanotechnologies reposent sur la connaissance et la maîtrise de l'infiniment petit. Elles regroupent l'ensemble des techniques qui permettent de fabriquer, de manipuler et de caractériser la matière à l'échelle nanométrique. De plus, les nanomatériaux magnétiques, suscitent un grand intérêt conduisant à des nouvelles fonctionnalités de l'électronique de spin (spintronique). La première manifestation des effets caractéristiques de la spintronique a été la magnétorésistance géante (GMR) en 1988 par Peter Grünberg et Albert Fert dans une structure multicouche [17].

Dans cette thèse, nous étudions les propriétés magnétiques et diélectriques de différentes nanostructures de types graphène, graphyne, stanene, ovalene, naphthalène et borophene. Nous commençons par déterminer les diagrammes de phases à l'état fondamental (au zéro degré Kelvin) pour les différents systèmes étudiés. En outre, pour une température non-nulle, nous nous basons sur les simulations de Monte Carlo afin d'étudier les propriétés magnétiques et diélectriques de ces nanostructures, à savoir : l'aimantation, la polarisation, les susceptibilités diélectriques et magnétiques et enfin les cycles d'hystérésis. Ce travail de thèse comporte quatre chapitres, en plus d'une introduction et conclusion générales. Le premier chapitre constitue une revue bibliographique des propriétés magnétiques des matériaux et les modèles et méthodes de calcul. Dans le second chapitre nous étudions les nanostructures de type graphyne, stanene et naphthalène tenant compte de l'interaction RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida). Le troisième chapitre est consacré à la localisation de la température de compensation dans les nanostructures telles que graphène, borophene, naphthalène et ovalène en fonction des différents paramètres physiques, notamment les couplages entre spins, le champ cristallin associé à chaque type de spin, le champ magnétique externe et la taille du système étudié. Le quatrième et dernier chapitre est réservé à l'étude du comportement de l'aimantation, de la polarisation et de la susceptibilité dans les structures de coronene monocouche et graphyne en monocouche et en bicouche.

CHAPITRE I : Propriétés magnétiques des matériaux, modèle et méthode de calcul

I.1 Introduction

Les propriétés magnétiques des matériaux proviennent de leurs moments magnétiques atomiques produits par le spin et le moment cinétique de leurs électrons. Elles sont déterminées à l'échelle macroscopique par le comportement du moment magnétique des atomes à l'échelle microscopique. L'origine du moment magnétique vient de l'interaction et du mouvement des électrons dans le matériau. Il présente deux comportements différents de l'électron : un moment magnétique intrinsèque de spin et un moment magnétique orbital qui est dû à la rotation de l'électron dans son orbite. Pour un atome libre, le moment magnétique M , est donné par :

$$M = gJ\mu_B \quad (I. 1)$$

où : g représente le facteur de Landé qui est le rapport entre le moment magnétique et le moment angulaire.

J est le moment angulaire total de l'atome. $J = L + S$, où L est le moment angulaire orbital et S est le moment angulaire de spin. Son signe est déterminé par la loi de Hund [18].

μ_B est le magnéton de Bohr ($1\mu_B = 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T}$),

Les matériaux magnétiques sont actuellement utilisés dans plusieurs domaines tels que les aimants permanents et l'enregistrement magnétique à haute densité. Les propriétés magnétiques influencées par les caractéristiques structurales à l'échelle atomique sont celles que l'on nomme propriétés intrinsèques : la température de Curie, l'aimantation de saturation et l'anisotropie magnéto cristalline. Généralement ces propriétés sont liées fortement d'une part à l'environnement et à la distance des premiers proches voisins et d'autre part à l'interaction entre les électrons et à leur interaction avec les noyaux et elles sont indépendantes de la quantité de matière. Pour la grande majorité des applications, la température de Curie doit être supérieure à la température ambiante, ce qui explique que les matériaux concernés sont à base des éléments de transition tel que le fer (Fe) et le cobalt (Co), qui ont une forte aimantation.

D'autre part, la mécanique statistique s'intéresse particulièrement aux propriétés de la matière condensée. La difficulté c'est que ces systèmes sont formés par un grand nombre d'atomes ou de particules. En effet, le calcul de la fonction de partition consiste à additionner un grand nombre d'états. Cependant, à la limite thermodynamique [19], le nombre d'états étant illimité,

la somme devient difficile à calculer. Par conséquent, il existe très peu de modèles où la fonction de partition est une expression analytique précise. Cela a conduit au développement de techniques d'approximations, comme les méthodes de la théorie des champs et les méthodes numériques. En outre, la méthode numérique la plus simple pour traiter le modèle de physique statistique est de le placer sur un réseau de taille limitée, de sorte que le calcul numérique de la fonction de partition devient facile. De plus, la simulation Monte Carlo permet de calculer la fonction de partition d'un modèle donné sur un grand réseau. L'idée de base de cette méthode est de simuler les fluctuations thermiques aléatoires du système d'un état à un autre.

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

I.2 Classifications magnétiques des matériaux

Les matériaux magnétiques sont généralement séparés en deux classes : les matériaux doux et les matériaux durs (aimants permanents). Les matériaux magnétiques doux peuvent être aimantés à l'aide de champs magnétiques faibles. Ils sont utilisés dans les machines électriques pour canaliser et concentrer le flux magnétique. Les matériaux magnétiques durs conservent leur état d'aimantation initial même lors de l'application d'un champ magnétique relativement élevé. Ils sont utilisés comme source de champ magnétique dans les machines électriques. La coercivité est le champ magnétique externe inverse qu'il faut appliquer pour rendre nulle l'aimantation d'un matériau qui a été porté à saturation. La limite généralement fixée entre les matériaux doux et les matériaux durs est une coercivité de 10 kA/m [20].

Par ailleurs, en dessous de la température critique dite température de Curie [21], il en découle un comportement responsable de différents comportements magnétiques tels que le diamagnétisme, le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme, le ferrimagnétisme, l'antiferromagnétisme et le superparamagnétisme. Tandis que pour une température en dessus de la température critique on parle du comportement paramagnétique.

Les catégories des matériaux magnétiques sont exposées ci-après :

I.2.1 Diamagnétisme

Les matériaux diamagnétiques se comportent comme des atomes non-magnétiques dont tous les électrons sont appariés [22]. Lorsqu'un matériau diamagnétique est soumis à un champ magnétique H , il y a création d'une très faible aimantation opposée au champ extérieur, et donc génération d'un champ magnétique opposé au champ extérieur. Lorsque le champ n'est plus appliqué, cette aimantation disparaît.

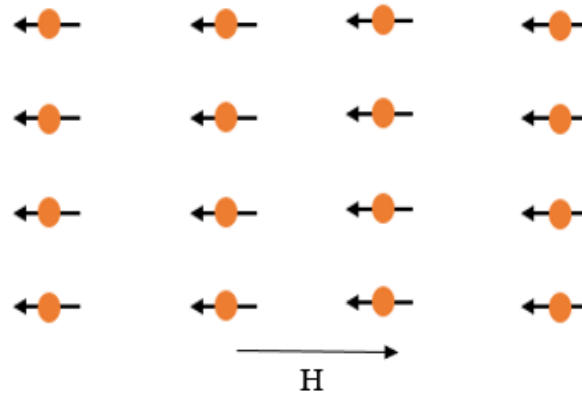


Fig. I.1 : Moments magnétiques de chaque atome s'opposent au champ magnétique extérieur H .

1.2.2 Paramagnétisme

Le paramagnétisme se produit quand les orbitales des atomes ne sont pas complètement remplies, conduisant à l'existence d'un petit moment magnétique total. Sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, l'aimantation est orientée dans le même sens du champ magnétique appliqué, le comportement paramagnétique des matériaux peut apparaître sous certaines conditions de température et de champ appliqué. Un matériau ferromagnétique ou ferrimagnétique devient paramagnétique quand la température du système est supérieure à la température de Curie ($T > T_C$). Tandis qu'un matériau antiferromagnétique devient paramagnétique quand la température du système est supérieure à la température de Néel ($T > T_N$).

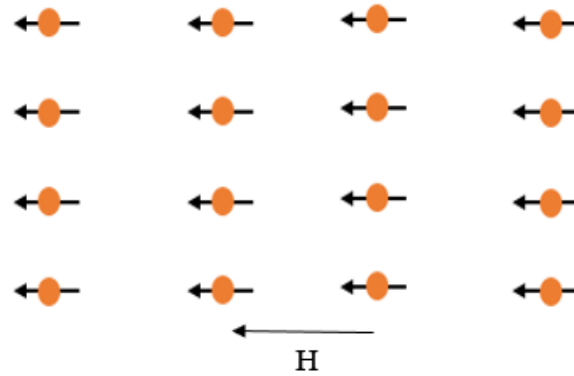


Fig. I.2 : Moments magnétiques de chaque atome s'alignent avec le champ magnétique extérieur H .

I.2.3 Ferromagnétisme

Le ferromagnétisme (resp. le ferrimagnétisme) désigne la capacité de certains corps à s'aimanter sous l'effet d'un champ magnétique extérieur et à garder une partie de cette aimantation. De plus, l'aimantation d'un matériau ferromagnétique décroît lorsque la température augmente pour s'annuler à une température de transition qui décrit la transition entre l'ordre et le désordre, cette température est appelée température de Curie T_C (resp. température de Néel T_N) [23]. À des températures supérieures à la température de Curie $T > T_C$, ces matériaux deviennent paramagnétiques ($M_{\text{tot}}=0$). De plus, dans ces matériaux les moments magnétiques sont alignés parallèlement comme le montre la Fig. I.3 [23].

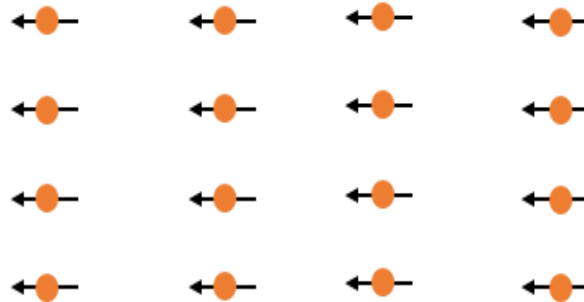


Fig. I.3 : Arrangement des moments magnétiques dans les matériaux ferromagnétiques.

I.2.4 Antiferromagnétisme

Dans un corps antiferromagnétique, l'état de plus basse énergie correspond à un alignement antiparallèle des moments magnétiques [22,23], comme le montre la Fig. I.4 :

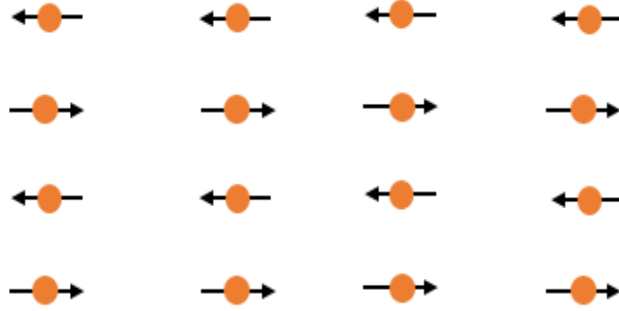


Fig. I.4 : Alignements de spins dans un matériau antiferromagnétique.

Il en résulte un regroupement des moments en deux sous réseaux d'aimantation égale et opposée de sorte qu'en absence de champ l'aimantation totale est nulle. La susceptibilité magnétique présente un maximum correspondant à une certaine température, analogue à la température de Curie pour les matériaux ferromagnétiques, appelée la température de Néel [23]. Au-dessus de cette température, un matériau antiferromagnétique devient paramagnétique. De nombreux composés des métaux de transition connus tels que les oxydes de cobalt, nickel, chrome et manganèse sont antiferromagnétiques [24].

I.2.5 Ferrimagnétisme

Les matériaux ferrimagnétiques se décomposent en deux ou plusieurs sous-réseaux magnétiques avec des spins non égaux [23, 24]. Les interactions d'échange dans les matériaux ferrimagnétiques mènent à un alignement des spins du même sous-réseau et à un alignement parallèle des spins des deux sous-réseaux différents comme illustré sur la Fig. 1.5 :

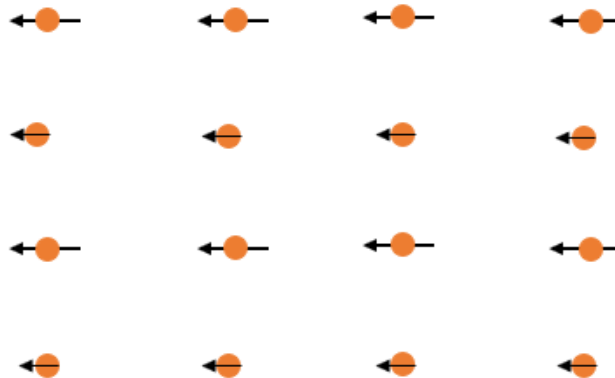


Fig. I.5 : Alignements de spins dans un matériau ferrimagnétique.

I.2.6 Anti-ferrimagnétisme

Dans les matériaux anti-ferrimagnétiques, les spins sont répartis en deux ou plusieurs sous-réseaux magnétiques non égaux, à l'intérieur desquels les interactions sont antiferromagnétiques. Les spins sont donc antiparallèles entre eux. C'est le cas notamment dans certains composés comportant deux types d'atomes de moments magnétiques de spins différents [22], comme le montre la figure I.6.

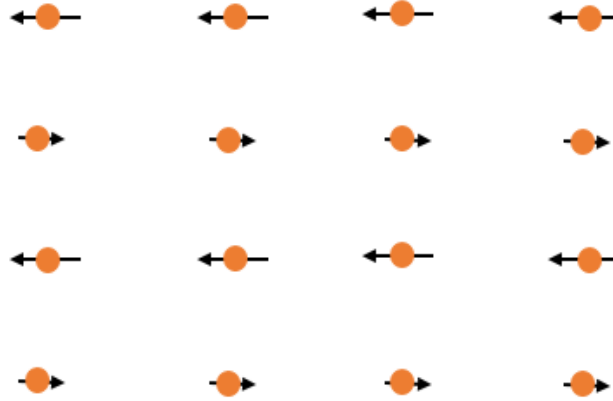


Fig. I.6 : Alignements de spins dans un matériau anti-ferrimagnétique.

I.2.7 Super-paramagnétisme

Le super-paramagnetisme est un comportement des matériaux ferromagnétiques ou ferrimagnétiques qui apparaît lorsqu'ils sont sous la forme de petits grains ou nanoparticules. Sous l'influence de la température, l'aimantation de ces nanoparticules peut se renverser spontanément. On appelle le temps moyen entre deux renversements temps de relaxation de Néel [25]. En outre, les directions des moments magnétiques des particules dans le cristal sont disposées de façon aléatoire. Ainsi, le moment magnétique net est nul.

I.3 Température de transition et de compensation

La température de transition correspond au passage d'une phase ferromagnétique à une phase paramagnétique, ceci est utilisé dans le domaine du stockage magnéto-optique qui emploie une combinaison des technologies optiques et magnétiques, pour la suppression et l'écriture de données.

I.3.1 Température de Curie

La température de Curie (T_C), ou température d'ordre magnétique, est l'une des propriétés intrinsèques des aimants permanents. Elle représente la température de transition de l'état magnétique ferromagnétique (ordonné) à l'état paramagnétique (désordonné). Ce processus est réversible car l'ordre ferromagnétique réapparaît dans le système quand sa température redescend en dessous de la température de Curie. La valeur de la température de Curie varie selon la composition chimique du matériau et des distances interatomiques.

I.3.2 Température de Néel

Similaire à la température de Curie (T_C) pour les matériaux ferromagnétiques. La température de Néel (T_N) représente la température de transition de l'état antiferromagnétique à l'état paramagnétique. Cette transition de phase se manifeste par l'apparition d'un pic dans le graphe de susceptibilité. Au-dessous de la température de Néel, la susceptibilité magnétique augmente avec l'augmentation de la température. La susceptibilité atteint un maximum pour $T=T_N$ et diminue pour $T>T_N$, selon la relation suivante :

$$\chi = \frac{C}{T_N + T} \quad (I.2)$$

où C est la constante de Curie.

I.3.3 Température de blocage

L'effet de la température à l'échelle nanométrique est crucial sur les moments magnétiques des nanoparticules. La température de blocage T_B est une grandeur physique qui dépend de la nature du matériau. Cette température peut être obtenue à partir du pic de la susceptibilité magnétique en fonction de la température. En effet, pour une valeur de température supérieure à la température de blocage, un matériau dans la phase ferromagnétique, antiferromagnétique ou ferrimagnétique devient super-paramagnétique.

La température de blocage peut être exprimée par la relation suivante [26] :

$$T_B = \frac{KV}{K_B \ln \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)} \quad (I.3)$$

où

K : Anisotropie magnétique de la nanoparticule,

V : Volume de la nanoparticule,

K_B : Constante de Boltzmann,

τ : Temps de mesure de l'aimantation de la nanoparticule,

τ_0 : Temps de mesure d'une valeur comprise entre 10^{-9} et 10^{-10} secondes.

I.3.4 Température de compensation

Les matériaux ferrimagnétiques peuvent présenter une température de compensation sous certaines conditions. La température de compensation (T_{comp}) est la température à laquelle, les aimantations partielles (M_S et M_σ) se compensent pour donner une aimantation totale nulle (M_{tot}) en dessous de la température critique. En fait, à la température de compensation T_{comp} , les moments magnétiques des deux sous-réseaux (S et σ) sont alignés antiparallèlement et ont la même valeur absolue.

Nous devons donc avoir :

$$|M_S(T_{comp})| = |M_\sigma(T_{comp})| \quad (I.4)$$

$$\text{sign } |M_S(T_{comp})| = -\text{sign } |M_\sigma(T_{comp})| \quad (I.5)$$

L'apparition d'un point de compensation rend le matériau prometteur pour des applications technologiques importantes, notamment dans le domaine de l'enregistrement thermomagnétique.

I.4. Classification des Transitions de phases

La transition de phase d'un système se traduit par le passage de ce système d'un état à un autre état différent relativement à certaines de ses propriétés physiques.

I.4.1 Classification d'Ehrenfest

Selon le physicien P. Ehrenfest, les différentes transitions de phase sont classées en deux catégories : les transitions du premier ordre et les transitions du second ordre [27].

Transitions du premier ordre :

Les transitions du premier ordre se caractérisent par une discontinuité dans les dérivées premières des fonctions thermodynamiques. Par exemple, les transitions entre les trois états :

(solide, liquide et gaz), sont des transitions de phase du premier ordre si la dérivée première de l'énergie libre par rapport au potentiel chimique est discontinue [28].

Transitions du second ordre :

Ce type de transition se distingue par la continuité des fonctions thermodynamiques et de ses dérivées premières et la discontinuité des dérivées d'ordre plus élevé. Aussi, le passage d'une phase à une autre d'une façon continue est possible. C'est le cas de la transition ferromagnétique-paramagnétique. En outre, la classification d'Ehrenfest reste inexacte au voisinage d'une transition de phase parce qu'elle ne prévoit pas la possibilité de divergence à la limite thermodynamique [19].

I.4.2 Classification de Landau

En 1937 L. Landau a proposé une autre classification qui est plus adaptée pour les transitions continues. Cette nouvelle classification est basée sur la notion de brisure de symétrie qui accompagne généralement ces transitions. Associé aux notions de brisure de symétrie, il est important donc de définir le paramètre d'ordre qui permet de déterminer l'ordre de transition de phase (tableau I.1). De plus, les systèmes physiques sont différemment définis selon le paramètre d'ordre associé.

Nature de la transition	Paramètre d'ordre
Para-Ferromagnétique	Aimantation M
Para-Antiferromagnétique	Aimantation des sous réseaux M_1 et M_2
Para-Ferroélectrique	Polarisation P
Gaz-liquide	Masse volumique ρ
Supraconductivité	Gap supraconducteur Δ
Superfluidité	Fonction d'onde superfluide

Tableau I.1 : Quelques exemples des paramètres d'ordre [29].

Ainsi Landau a proposé deux types de transition de phase :

Les transitions sans paramètre d'ordre :

Le paramètre d'ordre est discontinu, ces transitions sont toujours du premier ordre au sens d'Ehrenfest.

Les transitions avec paramètre d'ordre :

Dans ce type de transition, le paramètre d'ordre présente une discontinuité, cas d'une transition du premier ordre qui devient du second ordre ou d'ordre supérieur si le paramètre d'ordre est continu lors de la transition.

I.5 Interactions magnétiques

Les matériaux magnétiques peuvent être aperçus comme un ensemble de deux systèmes. 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 interactions magnétiques peuvent être décrites par plusieurs modèles : double-échange, super-échange et interaction RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida).

I.5.1 Interaction de double-échange

L'interaction de double échange est un type d'échange magnétique, elle a été proposée par Zener pour expliquer la forte corrélation entre le caractère métallique et ferromagnétique de certains composés [30]. Ce modèle ressemble superficiellement à l'interaction de super-échange. Le double échange est une interaction ferromagnétique qui fait intervenir les ions pour assurer le transport des électrons entre les cations séparés par une distance trop grande et pour lesquels l'échange direct (cation-cation) est nul.

Cas de deux ions Mn^{4+} et Mn^{3+} séparés par un ion oxygène. Au même moment où un électron de l'ion Mn^{4+} saute vers l'oxygène, celui-ci cède un électron vers l'autre ion Mn. Ceci n'est possible que si les deux ions de Mn ont leurs spins parallèles (Fig. I.7) [9].

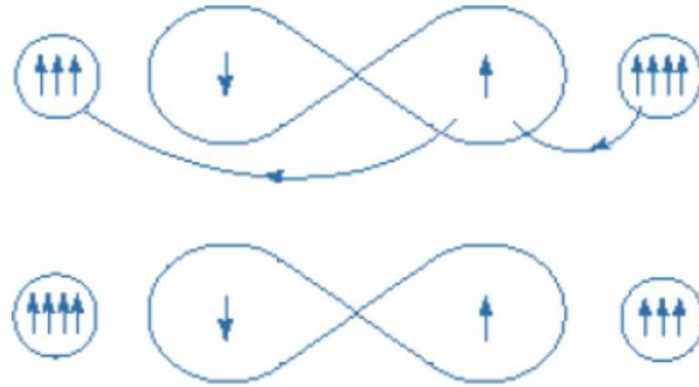


Fig. I.7 : Interaction de double échange.

L'interaction de double échange permet au système d'occuper deux états différents. Le système peut passer d'un état à l'autre si les spins des ions Mn sont alignés parallèlement car le saut peut se faire sans émission d'excitations magnétiques. L'état de plus basse énergie correspond à une hybridation résonante des deux états, l'état fondamental est donc un état ferromagnétique.

I.5.2 Interaction de super-échange

Cette interaction d'échange est indirecte. L'antiferromagnétisme via l'interaction de super-échange a été généré pour des cristaux de manganite de lanthane de formule chimique LaMnO_3 [31]. Il s'agit d'un processus indirect dans lequel les deux ions magnétiques (cations) les plus proches interagissent par le biais des ions oxygène (anions). Les moments magnétiques des ions sont liés les uns aux autres par l'interaction d'échange entre eux et la bande de valence. Dans ce cas, il n'y a pas de recouvrement orbital entre les ions magnétiques voisins les plus proches. De plus, l'interaction super-échange n'a pas besoin de la présence des porteurs de charges délocalisés. La Fig. I.8 montre à 180° différentes configurations (cation-anion-cation). Le premier cas correspond à l'antiferromagnétisme fort, obtenu quand deux cations ont une orbitale à moitié pleine pointant dans la direction de l'anion. Le couplage est direct par les règles de Hund. Dans le deuxième cas (l'antiferromagnétisme est faible), les électrons du cation ont une probabilité différente de zéro et identique pour les deux cations afin de se trouver sur l'orbitale vide. De ce fait, nous retrouvons l'antiferromagnétisme fort (cas 1) mais seulement dans un petit délai. Ce qui explique pourquoi l'interaction est dite faible. Dans le troisième cas, correspondant à l'interaction ferromagnétique faible, un des cations a une orbitale à moitié

pleine tandis que l'autre est vide. En effet, l'électron en question peut virtuellement passer d'un cation à l'autre à condition que les deux cations aient leurs spins parallèles [9].

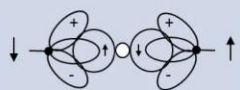
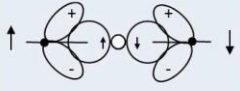
Cas	Configuration Orbitale	Couplage par Super-échange
1		Couplage antiferromagnétique fort
2		Couplage antiferromagnétique faible
3		Couplage ferromagnétique faible
Cation		Description
		Orbitales t_{2g} remplies et une orbitale e_g à demi-remplie pointant dans la direction de l'anion.
		Orbitales t_{2g} remplies et une orbitale e_g vide pointant dans la direction de l'anion.
Anion		Description
		Orbitale $p\sigma$

Fig. I.8 : Ordre magnétique en fonction du type d'orbitale des cations adjacents avec un angle 180° entre les deux cations [32].

I.5.3 Interaction RKKY

L'interaction RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) [33-35] se réfère au mécanisme de couplage de moments magnétiques ou spin d'électrons localisés dans l'enveloppe interne d ou f dans un métal au moyen d'une interaction avec les électrons de conduction. Ce modèle a été appliqué pour expliquer le couplage ferromagnétique et 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'application la plus importante de la théorie RKKY est la théorie de magnétorésistance géante (GMR) [36]. Cette interaction est caractérisée par un coefficient de couplage J :

$$J(R_i - R_{i'}) = 9\pi \left(\frac{J_F^2}{E_F}\right) F(2K_F |R_i - R_{i'}|) \quad (I.6)$$

avec :

$$F(x) = \left(\frac{x \cos(x) - \sin(x)}{x^4} \right) \quad (I.7)$$

où

$R_i, R_{i'}$: Moments magnétiques locaux,

K_F : Rayon de la surface de Fermi d'électron de conduction,

E_F : Energie de Fermi.

L'interaction RKKY favorise l'antiferromagnétisme à courtes distances.

Le coefficient qui favorise le ferromagnétisme à courtes distances J_{RKKY} est donnée par l'expression suivante :

$$J_{RKKY}(r) = \left(\frac{\cos(r)}{r^3} \right) \quad (I.8)$$

Le couplage par conséquent oscille entre le ferromagnétisme ($J_{RKKY} > 0$) et l'antiferromagnétisme ($J_{RKKY} < 0$), selon les distances entre les ions (Fig. I.9).

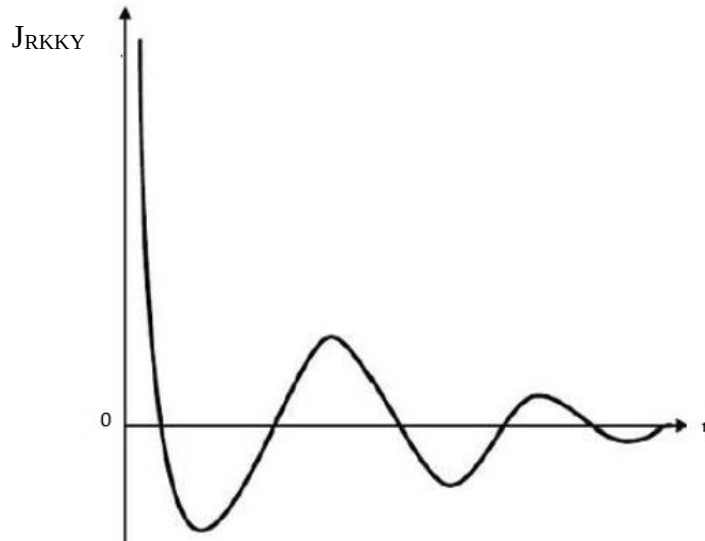


Fig. I.9 : Variation de la constante de couplage J_{RKKY} en fonction de la distance séparant les deux moments magnétiques locaux r [9].

I.6 Anisotropies magnétiques

L'anisotropie magnétique est importante pour déterminer la direction de l'aimantation. L'expression anisotropie magnétique se réfère à la dépendance des propriétés magnétiques de la direction dans laquelle elles sont mesurées. En général, les propriétés magnétiques d'un matériau ferromagnétique ou ferrimagnétique sont définies d'une part par les grandeurs de l'aimantation rémanente M_R et de l'aimantation M_S de saturation propre à ce matériau et d'autre part par les directions spatiales manifestées par les vecteurs (M_R et M_S). Ainsi l'action d'un champ magnétique externe (H) sur ces matériaux, suivant différentes directions spatiales, donne lieu à différentes réponses. En pratique, ce comportement est révélé expérimentalement à travers les différentes boucles d'hystérésis de différentes formes résultant d'une application d'un champ magnétique externe (H) suivant différentes directions.

I.6.1 Anisotropie magnéto-cristalline

L'anisotropie magnéto-cristalline est une propriété intrinsèque du matériau, car elle découle directement de l'interaction d'échange et de la symétrie du cristal. Cette anisotropie (cubique et uni-axiale) est causée par l'interaction spin-orbite. Ce couplage, qui est responsable de l'orientation des spins en fonction de la symétrie du réseau, tend à aligner les moments magnétiques le long des directions cristallographiques préférentielles. Il en résulte certains axes ou plans d'aimantation facile ou difficile. L'énergie magnéto-cristalline est généralement faible par rapport à l'énergie d'échange. Cependant, la direction de l'aimantation est uniquement déterminée par l'anisotropie car l'interaction d'échange permet d'aligner les moments magnétiques parallèles peu importe la direction. De plus, l'anisotropie uni-axiale est essentielle pour le stockage de l'information. En effet, les deux orientations stables de l'aimantation permettent l'encodage binaire de l'information [8].

I.6.2 Anisotropie de forme (ou dipolaire)

L'anisotropie de forme prédomine le reste des anisotropies magnétiques possibles dans le cas des systèmes magnétiques à faible dimension ou des nanoparticules de forme non sphérique. L'anisotropie de forme appelée aussi énergie magnétostatique provient du champ démagnétisant, ce dernier dépend de l'orientation de l'aimantation par rapport à la forme du matériau. La présence de ce champ démagnétisant rend anisotropes les propriétés magnétiques du matériau selon sa forme, ce champ est dû à l'interaction dipolaire. En effet, lorsque le

matériau est sphérique, l'énergie magnétostatique est nulle, mais elle prend des valeurs non négligeables si la symétrie n'est plus sphérique [8]. L'anisotropie de forme conduit à la formation de domaines magnétiques séparés par des parois de Bloch dans des systèmes de tailles mesoscopiques. Pour de petites particules, la formation d'une paroi étant trop coûteuse, un seul domaine magnétique s'y forme.

I.6.3 Anisotropie de surface ou d'interface

L'origine des anisotropies de surfaces et interfaces provient de la rupture ou du changement de la symétrie de translation des atomes des plans de surfaces. Ce comportement est à l'origine de la modification des propriétés magnétiques des atomes de ces plans de surfaces et interfaces. Les atomes de surface ont une symétrie inférieure comparée à celle des atomes à l'intérieur du matériau. Ces atomes ont une influence sur l'énergie de la particule qui peut dépendre de l'orientation de l'aimantation. Cela donne lieu à l'anisotropie de surface qui peut aussi être dépendante des impuretés absorbées à la surface. De plus, l'ampleur de la contribution de la surface à l'énergie de l'anisotropie magnétique augmente avec la diminution de la taille des matériaux [8].

I.6.4 Anisotropie d'échange

L'anisotropie d'échange apparaît dans les systèmes comportant une interface ferromagnétique /antiferromagnétique qui ont été refroidis sous champ à partir d'une température T supérieure à la température de Néel de la couche antiferromagnétique (T_N) et inférieure à la température de Curie de la couche ferromagnétique ($T_N < T < T_C$). Ce phénomène peut être expliqué qualitativement par l'existence d'une interaction d'échange à l'interface ferromagnétique / antiferromagnétique qui se caractérise d'un point de vue macroscopique par un décalage en champ magnétique (H) [8]. En effet, lorsqu'un champ magnétique est appliqué à une température T telle que $T_N < T < T_C$, les moments magnétiques ferromagnétique s'alignent suivant ce champ. L'antiferromagnétisme étant dans un état paramagnétique et les moments magnétiques sont orientés aléatoirement.

I.6.5 Anisotropie magnéto-élastique

Les contraintes élastiques intérieures ou extérieures sont à l'origine d'une anisotropie magnéto-élastique qui est essentiellement générée soit par les défauts d'empilement soit par les contraintes extérieures appliquées sur le matériau magnétique [8]. La déformation change la direction de l'aimantation au sein du matériau et induit donc une modification des propriétés magnétiques. L'existence d'une anisotropie magnéto-élastique est essentiellement due au couplage spin-orbite.

I.7. Simulation de Monte Carlo

I.7.1. Introduction

On appelle méthode de Monte Carlo toute méthode visant à calculer une valeur numérique, et utilisant des nombres aléatoires pour simuler les phénomènes comportant un ou plusieurs variables aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes. Le nom de ces méthodes fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monte-Carlo.

I.7.2. Concept de la simulation Monte Carlo

Le concept des simulations de Monte Carlo est de simuler les fluctuations thermiques aléatoires d'un état de système à un autre. La probabilité de trouver le système dans l'état a au cours de la simulation est égale au même état en système réel.

Nous allons discuter dans ce qui suit toutes les étapes de cette simulation. Nous commençons par parcourir le processus physique qui donne l'équation maîtresse :

Estimation

En physique statistique, nous sommes fréquemment amenés à calculer des valeurs moyennes de grandeurs observables. Pour un système en contact avec un thermostat de température T , la probabilité d'un micro-état a dont l'énergie est E_a est proportionnelle au facteur de Boltzmann :

$$e^{-\frac{E_a}{k_B T}} = e^{-\beta E_a} \quad (I.9)$$

L'estimation de toute quantité observable, telle que l'aimantation, la polarisation, la susceptibilité ou l'énergie interne est calculée par la valeur moyenne d'une quantité Q en sommant sur tous les états a du système et sur leurs probabilités respectives, et est donnée par :

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_a Q_a e^{-\beta E_a}}{\sum_a e^{-\beta E_a}} \quad (I.10)$$

Le dénominateur, noté Z , est la somme du facteur de Boltzmann pour tous les états :

$$Z = \sum_a e^{-\beta E_a} \quad (I.11)$$

La moyenne de Q ne peut être calculée que pour les très petits systèmes. Tandis que pour les grands systèmes, la sommation se fait sur un sous ensemble d'états. Ceci conduit à des imprécisions dans les calculs. Les techniques Monte Carlo consistent à choisir, au hasard, un sous ensemble d'états à partir d'une distribution de probabilité P_a à définir.

Supposons que le choix porte sur les sous ensemble $M = \{a_1, \dots, a_M\}$.

L'estimation de la quantité Q sera donnée par :

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{ai} P_{ai}^{-1} e^{-\beta E_{ai}}}{\sum_{j=1}^M P_{aj}^{-1} e^{-\beta E_{aj}}} \quad (I.12)$$

Plus le nombre M d'états dans l'échantillon augmente, plus on se rapproche de la vraie valeur de $\langle Q \rangle$, on peut traduire cela comme suit :

$$\langle Q \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} Q_M = Q_M \quad (I.13)$$

Comment choisir les M états pour que Q_M soit une bonne Estimation ? Ceci revient à choisir une distribution de probabilité P_a . Le choix le plus simple est que tous les P_a sont égaux, d'où :

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{ai} e^{-\beta E_{ai}}}{\sum_{j=1}^M e^{-\beta E_{aj}}} \quad (I.14)$$

En fait, c'est le plus mauvais choix.

Dans la majorité des méthodes numériques, il n'est pas possible d'échantillonner un grand nombre d'états. Cependant, l'idée est de faire un échantillonnage seulement sur les configurations importantes. Cette méthode d'échantillonnage est connue sous le nom de l'échantillon important. Les simulations Monte Carlo sont également basées sur d'autres concepts tels que l'ergodicité, la balance détaillée et le rapport d'acceptation [8, 9].

Échantillon important

La méthode Monte Carlo se base sur le choix d'un échantillon qui contient les états dominants. Cette opération s'appelle l'échantillon important [38]. On peut voir à partir de l'équation maîtresse que la moyenne est effectuée dans le temps sur les états que traverse le système au cours de la mesure. On ne suppose pas que le système passe par tous les états durant la mesure.

Les systèmes réels se comportent comme une sorte de Monte Carlo pour calculer leurs propriétés. Les états de l'échantillon ne sont pas équiprobables, mais ils sont distribués selon la probabilité de Boltzmann qui permet d'améliorer l'estimation :

$$P_a = \frac{e^{-\beta E_a}}{Z} \quad (I.15)$$

L'estimation Q_M devient :

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{ai} \quad (I.16)$$

Ce résultat est mieux que l'estimation obtenue en équation (I.14) lorsque tous les P_a sont égaux.

Processus de Markov

L'un des points importants de la simulation Monte Carlo est de générer, de façon aléatoire, les états selon la distribution de probabilité de Boltzmann. En général, les simulations Monte Carlo utilisent le processus de Markov [39] pour générer les états. Dans notre cas, le processus de Markov génère un état b à partir d'un état a , donc la probabilité de transition $\omega(a \rightarrow b)$ doit satisfaire les points suivants :

- i) Ne varie pas avec le temps.
- ii) Dépend seulement des états a et b .

Ceci traduit le fait que la probabilité de transition $\omega(a \rightarrow b)$ d'un état a à un autre b du processus de Markov est toujours constante et doit satisfaire à la relation de fermeture [19] :

$$\sum_b \omega(a \rightarrow b) = 1 \quad (I.17)$$

La probabilité de transition $\omega(a \rightarrow a)$ n'est pas obligatoirement nulle.

Dans la simulation Monte Carlo, on répète le processus de Markov pour générer la chaîne de Markov des états [40, 41]. Ce processus est choisi de façon à générer une succession d'états avec des probabilités de Boltzmann. La simulation décrit correctement l'évolution du système réel. De plus, pour la réalisation de ce processus de Markov, on aura besoin de deux conditions supplémentaires : l'ergodicité et la balance détaillée.

Ergodicité

La condition d'ergodicité est que le système peut, à partir d'un état donné, passer, lors du processus de Markov, par n'importe quel état après un temps suffisamment long. Si par exemple

toutes les probabilités de transition à partir d'un état donné sont nulles, alors l'ergodicité est violée. De plus, la plupart des algorithmes de Monte Carlo configure toutes les probabilités de transition pour la valeur zéro. Il faut dans ce cas faire attention à ne pas créer un algorithme qui ne satisfait pas la condition d'ergodicité.

La balance détaillée

La condition de la balance détaillée assure que l'équilibre à venir n'est qu'une distribution de Boltzmann et non pas une autre distribution [42]. Si le système est en équilibre, les probabilités de transition à partir d'un état vers le même état sont égales :

$$\sum_b P_a \omega(a \rightarrow b) = \sum_b P_b \omega(b \rightarrow a) \quad (I.18)$$

À partir de $\sum_b \omega(a \rightarrow b) = 1$, on a :

$$P_a = \sum_b P_b \omega(b \rightarrow a) \quad (I.19)$$

Pour tous ensembles de probabilités de transitions, qui satisfont l'équation (I.19), la distribution de probabilité P_a sera un état d'équilibre à partir de la dynamique du processus de Markov. Malheureusement, satisfaire cette équation ne garantit pas d'atteindre P_a à partir de n'importe quel état du système [43]. Pour démontrer cela, on suppose que la probabilité de transition $\omega(a \rightarrow b)$ représente les éléments de la matrice W qui est la matrice de Markov.

On considère $q_a(t)$, si on mesure le 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 :

$$q_b(t+1) = \sum_a \omega(a \rightarrow b) q_a(t) \quad (I.20)$$

En notation matricielle, l'équation (I.20) devient :

$$Q(t+1) = W \cdot Q(t) \quad (I.21)$$

Quand le processus de Markov atteint l'équilibre, on aura :

$$Q(\infty) = W \cdot Q(\infty) \quad (I.22)$$

Cependant, le processus peut également atteindre un équilibre dynamique par rotation. Cette rotation de Q dans toute la chaîne est appelée cycle limite [19].

Dans ce cas $Q(\infty)$ devient :

$$Q(\infty) = W^n \cdot Q(\infty) \quad (I.23)$$

où n est la taille du cycle.

Donc l'équation (I.19) ne garantit pas l'équilibre défini par la distribution. Pour résoudre ce problème, on impose la condition de balance détaillée donnée par :

$$P_a \omega(a \rightarrow b) = P_b \omega(b \rightarrow a) \quad (I.24)$$

Cette condition élimine le cycle limite [44]. Lorsque le temps approche à l'infini ($t \rightarrow \infty$), $Q(t)$ tend exponentiellement vers le vecteur propre qui correspond à la plus grande valeur propre de W . De plus, à partir de l'équation I.22, la plus grande valeur propre de la matrice de Markov est 1. L'équation (I.19), s'écrit comme suit :

$$P = W \cdot P \quad (I.25)$$

À l'équilibre, lorsque le temps s'approche de l'infini ($t \rightarrow \infty$), $Q(t)$ tend vers P . Les systèmes réels obéissent à la balance détaillée.

Pour que la distribution à l'équilibre soit la distribution de Boltzmann, alors une condition additionnelle est donnée par :

$$\frac{\omega(a \rightarrow b)}{\omega(b \rightarrow a)} = \frac{P_b}{P_a} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (I.26)$$

L'équation (I.26) et la relation (I.17) sont les contraintes du choix de la probabilité de transition $\omega(a \rightarrow b)$. Le but donc est d'écrire un programme qui bâtit la chaîne de Markov d'états à partir des probabilités de transition. On laisse le programme tourner suffisamment longtemps pour que $q_a(t)$ tende à l'équilibre vers la distribution de Boltzmann P_a .

Rapport d'acceptation

Généralement les méthodes standards ne s'appliquent pas aux nouveaux problèmes. On est obligé donc de construire de nouveaux algorithmes pour les besoins spécifiques et pour cela on propose plusieurs processus de Markov. De plus, le bon ensemble des probabilités de transition n'est pas sûrement défini par un algorithme donné. Le rapport d'acceptation permet de trouver les bonnes probabilités de transition à partir d'un processus de Markov quelconque.

Donc la condition $\omega(a \rightarrow a) \neq 0$ dans ce cas est autorisée et satisfait toujours à la balance détaillée, on peut ajuster $\omega(a \rightarrow b)$ en gardant $\sum_b \omega(a \rightarrow b) = 1$.

En conséquence, la probabilité de transition est donnée comme suit :

$$\omega(a \rightarrow b) = g(a \rightarrow b) A(a \rightarrow b) \quad (I.27)$$

Avec $g(a \rightarrow b)$ la probabilité de sélection, qui est la probabilité pour que l'algorithme génère l'état final b à partir de l'état initial a .

$A(a \rightarrow b)$ est le taux d'acceptation (appelé aussi probabilité d'acceptation). En effet, si on commence à l'état a et que l'algorithme génère l'état b , on doit accepter b et changer l'état du système à b , pendant une fraction de temps $A(a \rightarrow b)$. Le temps reste dans l'état a , l'acceptation est arbitraire entre zéro et 1 ($0 < A(a \rightarrow b) < 1$).

Choisir $A(a \rightarrow b)=0$ est équivalent à prendre $\omega(a \rightarrow a)=1$ pour toutes les transitions. Ceci donne une liberté totale du choix de la probabilité de sélection :

$$\frac{\omega(a \rightarrow b)}{\omega(b \rightarrow a)} = \frac{g(a \rightarrow b) A(a \rightarrow b)}{g(b \rightarrow a) A(b \rightarrow a)} \quad (I.28)$$

Avec le rapport $\frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} \in [0, \infty[$ donc les probabilités de sélection $g(a \rightarrow b)$ et $g(b \rightarrow a)$ peuvent prendre n'importe quelle valeur.

Pour éviter que l'algorithme soit long, on choisit l'acceptation proche de 1, comme c'est le rapport $\frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)}$ qui est fixé, on prend l'un des deux ($A(a \rightarrow b)$ ou $A(b \rightarrow a)$) égal à 1 et l'autre est choisi de façon à satisfaire à la balance. Donc le meilleur algorithme ajuste bien $g(a \rightarrow b)$ et pose $A(a \rightarrow b) \approx 1$.

I.8 Conditions aux bords

Tout modèle numérique est fini. Le but des simulations Monte Carlo est de reproduire un système réel infini d'une manière approximative. Pour cela, la question des conditions aux bords s'impose. Ceci a donné naissance à plusieurs types de conditions aux limites.

I.8.1 Conditions aux limites périodiques

Cette méthode a pour but d'éliminer les limites aux bords. En effet, elle consiste à joindre la première ligne des spins du réseau avec la dernière ligne, la première colonne du réseau avec la dernière colonne, voir l'exemple d'un réseau carré dans la Fig. I.10.

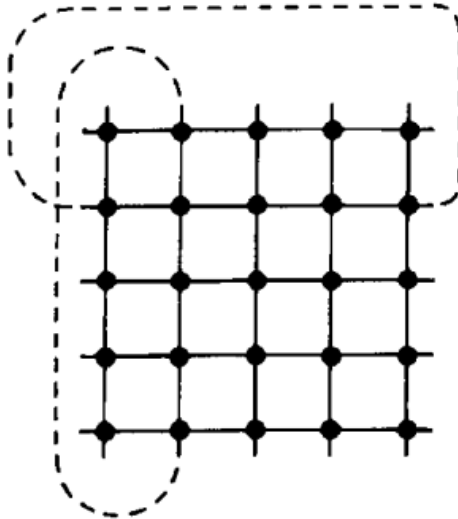


Fig. I.10 : Conditions aux limites périodiques pour le modèle d'Ising bidimensionnel [8, 37].

I.8.2 Conditions aux limites périodiques vis

Dans cette approche, il s'agit d'une représentation des spins du réseau telle une chaîne unidimensionnelle qui s'enveloppe autour du système. En effet, le dernier spin de la ligne et le premier spin de la ligne suivante sont proches voisins, comme illustré sur la Fig. I.11 pour le modèle d'Ising bidimensionnel.

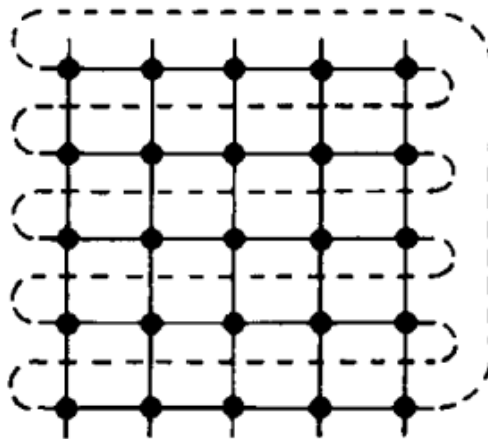


Fig. I.11 : Conditions aux limites périodiques vis pour le modèle d'Ising bidimensionnel [8,37].

I.8.3 Conditions aux limites de bord libre

Un autre type de frontière n'implique aucun type de connexion entre la fin d'une rangée et toute autre rangée sur le réseau. Au lieu de cela, les tours à la fin d'une rangée n'ont aucun voisin dans cette direction (Fig. I.12). Notons aussi que les limites aux bords libres constituent

l'approche la plus réaliste pour certaines situations telles que la modélisation du comportement des particules ou des nanoparticules super-paramagnétiques.

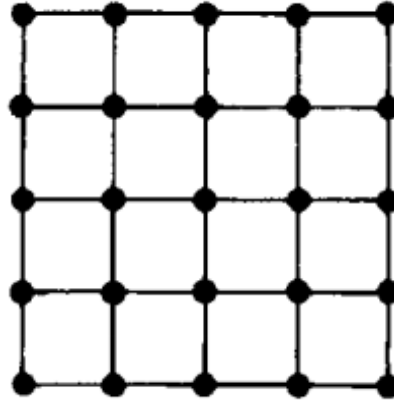


Fig. I.12 : Conditions aux limites de bord libre pour le modèle d'Ising bidimensionnel [8,37].

I.9. Modèles de Spin

La modélisation d'un système de spin est un aspect clé du magnétisme à température finie. Les modèles de spin permettent une description simple du comportement d'un spin dans un milieu magnétique. Une description de ces modèles est proposée.

I.9.1 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est un modèle fréquemment utilisé pour tester de nouvelles idées et méthodes en physique statistique. Afin de représenter les atomes qui composent un matériau magnétique, chaque atome a un moment magnétique appelé spin. Pour simplifier, les spins n'auront que deux orientations possibles : haut (on dira que le spin est +1) ou bas (on dira que le spin est -1). Ces spins interagissent entre eux deux à deux, uniquement entre premiers voisins avec une énergie d'interaction. Initialement, les spins sont orientés aléatoirement. Le but est de montrer l'existence d'une transition de phase dans ce modèle.

L'hamiltonien du système d'Ising est défini comme suit :

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{\langle i \rangle} S_i \quad (\text{I. 29})$$

L'hamiltonien se compose de deux sommes. La première concerne les interactions entre les spins adjacents notés $\langle i, j \rangle$, les sites i et j sont les plus proches voisins. La deuxième sommation se réfère au champ magnétique extérieur. Les signes négatifs dans l'hamiltonien du système

d'Ising dictent simplement le choix du signe pour le paramètre d'interaction J_{ij} et le champ magnétique extérieur H .

Par conséquent, on distingue trois types d'interactions :

$J_{ij} > 0$: l'interaction entre les spins S_i et S_j est du type ferromagnétique,

$J_{ij} < 0$: l'interaction entre les spins S_i et S_j est du type antiferromagnétique,

$J_{ij} = 0$: il n'y a pas d'interaction entre les spins S_i et S_j .

De plus, 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, la polarisation, l'énergie, la chaleur spécifique et la susceptibilité à une température donnée.

I.9.2 Modèle de Potts

Ce modèle est une généralisation du modèle d'Ising. Il permet de comprendre le comportement des matériaux ferromagnétiques. Il est également utilisé pour expliquer certains phénomènes tels que les transitions de phases et les propriétés magnétiques des structures périodiques en couches. Le modèle de Potts est similaire au modèle d'Ising, sauf le fait que le spin S_i sur chaque site du réseau peut prendre plus de deux valeurs discrètes différentes. Généralement, ces valeurs sont représentées par des nombres entiers positifs à partir de 1, et le modèle de Potts à q états est celui dans lequel chaque spin peut avoir des valeurs entières $S_i = 1 \dots q$.

L'hamiltonien du modèle de Potts est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{S_i S_j} \quad (\text{I.30})$$

où $\delta_{S_i S_j}$ est le symbole de Kronecker qui satisfait :

$$\delta_{S_i S_j} = \begin{cases} 1 & \text{si } S_i = S_j \\ 0 & \text{si } S_i \neq S_j \end{cases} \quad (\text{I.31})$$

Le modèle de Potts est équivalent au modèle d'Ising pour $q = 2$, et pour $q > 2$ le système transite de l'état ferromagnétique à l'état paramagnétique.

I.9.3 Modèle de Blume-Capel

Le modèle Blume-Capel est parmi les modèles les plus étudiés en physique statistique [45, 46]. 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. Il a été introduit au départ par Blume pour expliquer la transition de phase magnétique du premier ordre observée dans le dioxyde d'uranium UO_2 , et indépendamment, par Capel en tant que modèle théorique pouvant présenter des transitions de phases magnétiques du premier ordre.

L'hamiltonien du modèle de Blume Capel est défini comme suit :

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - D \sum_{\langle i \rangle} S_i^2 \quad (\text{I. 32})$$

Les sites i et j sont les plus proches voisins et D est le champ cristallin.

Pour cet hamiltonien, on a trois cas particuliers :

$D = -\infty$: le système est réduit au modèle d'Ising de spin $1/2$ qui présente un ordre magnétique $\langle S \rangle \neq 0$ à basses températures.

$D = 0$: c'est le modèle simple d'Ising avec $S = 1$ qui présente aussi un ordre magnétique à basses températures.

$D = +\infty$: le système est réduit dans le cas où $S = 0$ sans ordre magnétique $\langle S \rangle = 0$.

I.9.4 Modèle de Blume-Emery-Griffiths

Le modèle de Blume-Emery-Griffiths (1971) est un modèle de spin qui présente une grande variété de phénomènes critiques et multi-critiques [47, 48]. Ce modèle a été introduit au début pour décrire la séparation de phase et la superfluidité dans les mélanges $^3\text{He}-^4\text{He}$ [46]. 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 Blume-Emery-Griffiths (BEG) est décrit par l'hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 - D \sum_{\langle i \rangle} S_i^2 - H \sum_{\langle i \rangle} S_i \quad (\text{I. 33})$$

Les deux premières sommations concernent les interactions entre les spins adjacents notés $\langle i,j \rangle$.

J_{ij} et K sont, respectivement, l'interaction bilinéaire et l'interaction biquadratique.

D et H sont les champs cristallin et magnétique externe, respectivement.

I.9.5 Modèle XY

Les modèles de spin continu constituent une autre généralisation du modèle d'Ising. Dans ces modèles, les spins sur le réseau ont une gamme continue de valeurs, plutôt qu'un spectre discret comme dans les modèles vus précédemment. Les deux modèles les plus fréquents sont : le modèle XY et le modèle d'Heisenberg. 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) [49].

L'hamiltonien du modèle XY est exprimé par la relation suivante :

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{H} \sum_{\langle i \rangle} \vec{S}_i \quad (\text{I. 34})$$

où J_{ij} est le paramètre d'interaction d'échange, $\vec{S}_i$ et $\vec{S}_j$ sont les opérateurs de spin et $\vec{H}$ est le champ magnétique externe.

Les spins peuvent être représentés soit par leurs composantes S_x et S_y qui satisfont la contrainte $S^2 = S_x^2 + S_y^2 = 1$, soit par une variable angulaire qui indique la direction de spin [19]. Il convient donc de réécrire l'hamiltonien en fonction des variables angulaires :

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - \sum_{\langle i \rangle} (H_x \cos(\theta_i) + H_y \sin(\theta_i)) \quad (\text{I. 35})$$

Où les angles θ_i et θ_j sont des variables angulaires locales qui spécifient les orientations des spins. Le modèle XY s'étale aussi à l'étude des systèmes tridimensionnels en dépit du fait que les spins sont à deux dimensions.

I.9.6 Modèle d'Heisenberg

Le modèle d'Heisenberg est un modèle de spin qui permet de traiter directement la dépendance en spin d'un système de plusieurs électrons. La différence entre le modèle Ising et le modèle Heisenberg est que le premier décrit les spins comme dipôles qui ne peuvent avoir que deux orientations possibles (haut ou bas), tandis que le second permet aux vecteurs de spin de repérer toutes les directions. Les spins du modèle d'Heisenberg sont donc des vecteurs unitaires à trois dimensions. En effet, les spins d'Heisenberg sont représentés par deux méthodes, 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 des coordonnées sphériques [49].

Le modèle d'Heisenberg est décrit par l'hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} (J_x S_{xi} S_{xj} + J_y S_{yi} S_{yj} + J_z S_{zi} S_{zj}) - \sum_{\langle i \rangle} (H_x S_{xi} + H_y S_{yi} + H_z S_{zi}) \quad (I.36)$$

Où J_x , J_y et J_z sont les paramètres d'interaction d'échange suivant l'axe x , y et z respectivement. H_x , H_y et H_z sont les composantes du champ magnétique extérieur suivant l'axe x , y et z respectivement.

Le modèle de Heisenberg est connu aussi comme le modèle XYZ (ou le modèle XXZ si $J_x = J_y \neq J_z$).

Le cas spécial $J_z = 0$, $J_x = J_y$ correspond au modèle XY.

I.10 Algorithme de Simulation

I.10.1 Algorithme de Metropolis

La méthode de Monte Carlo (MC) Metropolis a été introduite en physique de la matière condensée par Metropolis et al. en 1953 [50]. En fait, cette méthode est particulièrement adaptée au calcul d'intégrales de dimension supérieure à 10. Les premières simulations furent réalisées dans l'ensemble canonique (N , V et T constants), puis la technique fut étendue à d'autres ensembles statistiques. Nous générons une séquence aléatoire d'états accessibles appelé chaîne de Markov [40, 41] dans l'espace des configurations du système. On échantillonne en privilégiant les régions où le facteur de Boltzmann $\exp(\frac{-U}{k_B T})$ (densité de probabilité de l'ensemble canonique dans cet espace) est le plus élevé (algorithme de Metropolis). La probabilité d'une configuration particulière d'énergie potentielle U_i est alors proportionnelle à $\exp(\frac{-U_i}{k_B T})$, en d'autres termes, l'acceptation d'une configuration de la chaîne de Markov est déterminée par une fréquence proportionnelle au facteur de Boltzmann.

Une propriété d'équilibre est alors obtenue comme une simple moyenne dans les configurations acceptées. Cette exploration de l'espace des configurations, en suivant l'algorithme de Metropolis, constitue le premier cas d'échantillonnage suivant l'importance en mécanique statistique. Elle est encore largement utilisée de nos jours parce qu'elle représente une méthode simple et relativement efficace pour obtenir des moyennes de grandeurs physiques dans un ensemble statistique.

En plus, l'algorithme de Metropolis se généralise à tout problème de calcul statistique. Cet algorithme est caractérisé par le choix de l'acceptation $A(a \rightarrow b)$.

On considère la dynamique de retournement d'un seul spin à chaque étape Monte Carlo. La différence d'énergie entre deux états successifs ne dépasse pas $2zJ$ où z est le nombre des sites voisins d'un site donné et J décrit l'interaction d'échange [19]. De plus, dans ce cas, toutes les probabilités de sélection sont égales :

$$g(a \rightarrow b) = \frac{1}{N} \quad (I.37)$$

où N est le nombre de spins du système.

L'équation de la balance détaillée s'écrit :

$$\frac{\omega(a \rightarrow b)}{\omega(b \rightarrow a)} = \frac{g(a \rightarrow b)A(a \rightarrow b)}{g(b \rightarrow a)A(b \rightarrow a)} = \frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (I.38)$$

On choisit :

$$A(a \rightarrow b) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_b - E_a)} \quad (I.39)$$

Avec A_0 est arbitraire. L'algorithme est plus efficace pour les grandes valeurs de l'acceptance $A(a \rightarrow b)$.

L'algorithme de Metropolis avec la dynamique de retournement d'un seul spin est défini donc par l'acceptance suivante :

$$A(a \rightarrow b) = \begin{cases} e^{-\beta(E_b - E_a)} & \text{si } E_b - E_a > 0 \\ 1 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (I.40)$$

qui est l'algorithme de Metropolis lancé pour le modèle d'Ising avec la dynamique de retournement d'un seul spin [19,48].

Implémentation de l'algorithme Metropolis dans le modèle d'Ising :

Pour le modèle d'Ising en appliquant un champ magnétique externe, le nouvel état b est généré à partir de l'ancien état a . Les deux états ne diffèrent que par un simple retournement. Certains détails pratiques devraient être respectés lors de l'application de l'algorithme de Metropolis :

L'hamiltonien du système d'Ising est défini comme suit :

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (I.29)$$

Configuration initiale

L'état initial ne devrait, en aucun cas, influencer le nouvel état. Toutefois, pour atteindre l'équilibre plus rapidement, la configuration initiale doit être choisie correctement.

Effets de taille

Le réseau d'un système examiné peut-être limité par la capacité de l'ordinateur. Pour cela, la taille du réseau étudié doit être définie d'une façon à faire apparaître les propriétés macroscopiques d'un système infini. De plus, il faut définir la limite thermodynamique pour laquelle les grandeurs physiques deviennent invariantes. Pour cela, il faut calculer une moyenne pour des tailles différentes.

Erreurs statistiques

Le premier détail qui doit être résolu est le grand nombre d'étapes Monte Carlo qui est limité par la capacité de l'ordinateur comme c'est le cas pour la taille du réseau. De plus, à une certaine étape Monte Carlo, l'équilibre est obtenu et les mesures peuvent donc être faites. Les moyennes en considération peuvent être calculées à partir de cette étape d'équilibre jusqu'à la dernière étape Monte Carlo choisie. Cependant, pour éviter l'effet des erreurs statistiques qui deviennent plus grandes près du point critique, l'étape Monte Carlo qui définit le début de l'équilibre du système doit être déterminée soigneusement.

Pour la simulation :

On considère le cas où le champ magnétique extérieur est nulle $H=0$.

On génère l'état b à partir de l'état a. Ces deux états diffèrent par le retournement d'un seul spin. Puis, il est important de choisir par exemple un spin m au hasard sur le réseau étudié et de considérer son renversement (flip) $S_m \rightarrow -S_m$. On calcule la variation d'énergie entre les deux états ($E_b - E_a$) à partir de l'expression de l'hamiltonien (I.29) :

$$\begin{aligned} E_b - E_a &= -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^b S_j^b + J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^a S_j^a \\ &= -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^a (S_m^b - S_m^a) \end{aligned} \quad (I.41)$$

Si $S_m^a = -1$ donc $S_m^b = 1$ et $S_m^b - S_m^a = 2$

Si $S_m^a = 1$ donc $S_m^b = -1$ et $S_m^b - S_m^a = -2$

Alors :

$$S_m^b - S_m^a = -2S_m^a$$

Donc :

$$\begin{aligned} E_b - E_a &= 2 J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^a S_m^a \\ &= 2 J_{ij} S_m^a \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^a \quad (I.42) \end{aligned}$$

Si $E_b - E_a \leq 0$ on accepte le retournement $S_m \rightarrow -S_m$.

Si $E_b - E_a > 0$ on accepte le retournement $S_m \rightarrow -S_m$ mais avec la probabilité $A(a \rightarrow b) = e^{-\beta(E_b - E_a)}$.

On choisit un nombre aléatoire $0 \leq w < 1$ si $w < A(a \rightarrow b)$ on accepte le retournement.

On répète cette étape plusieurs fois.

On présente l'algorithme de Metropolis de la manière suivante (Fig. I.13) :

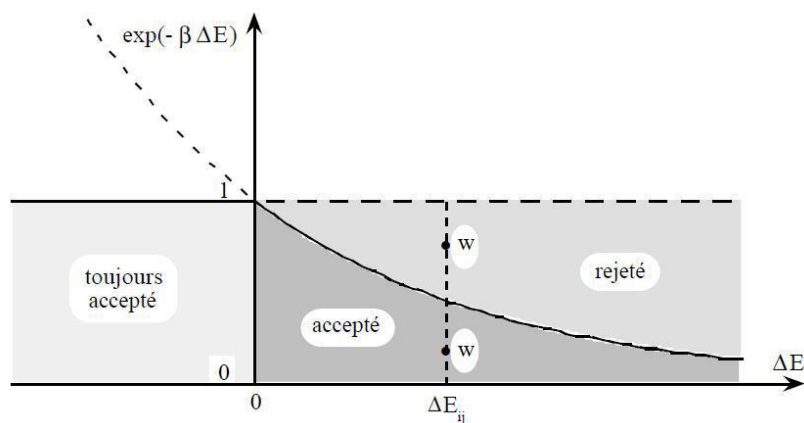


Fig. I.13 : Interprétation graphique de l'algorithme de Monte Carlo Metropolis [17].

L'algorithme suivant récapitule les différentes étapes vues précédemment [51].

Algorithme de Monte Carlo Metropolis

1. On part d'une configuration initiale (spins répartis aléatoirement)
 2. On choisit un spin m au hasard et on considère son renversement $S_m \rightarrow -S_m$
 3. On calcule la variation d'énergie ΔE correspondante
 4. **si** $\Delta E \leq 0$
 5. On accepte le renversement (flip)
 6. **fin si**
 7. **si** $\Delta E > 0$
 8. On accepte avec une probabilité $P = \exp(-\beta\Delta E)$
 9. on tire un nombre aléatoire w entre 0 et 1
 10. **si** $w \leq P$
 11. on accepte
 12. **sinon**
 13. on refuse
 14. **fin si**
 15. **fin si**
 16. Retour à l'étape 2
-

Donc vu l'importance de cet algorithme, on étudiera dans les chapitres qui suivent les propriétés magnétiques et diélectriques des nanomatériaux grâce à la simulation Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis.

D'autre part, la simulation de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis peut être proche de la simulation des systèmes réels, quoiqu'elle prend du temps pour atteindre l'équilibre et

représente des fluctuations de grande intensité au voisinage de la température de transition. Pour résoudre ce problème de nombreux algorithmes ont été développés.

D'une autre part, quand la longueur de corrélation est importante au voisinage de la température critique T_c , des domaines se forment, dans lesquels tous les spins pointent dans la même direction. Il devient alors très difficile de retourner ce domaine grâce à l'algorithme de Metropolis, car cela se fait spin par spin avec une grande probabilité de rejet du retournement [19]. En effet, quand la probabilité de retourner un spin du bord est grande, on fait retourner tout le domaine en même temps. Ces algorithmes mis en place sont appelés : algorithmes de retournement d'amas ou algorithmes de l'amas.

I.10.2 Algorithme de Wolff

L'algorithme de Ulli Wolff (1989) est basé sur le travail de Swendsen et Wang (1987) [53]. Le concept de cette méthode est de chercher des clusters (appelé aussi amas de spins) avec la même orientation de spins et de les flipper une seule fois. En effet, l'algorithme de Wolff se base sur le choix aléatoire d'un spin du réseau et voir s'il existe un voisin qui possède la même orientation. Ensuite on continue de proche en proche jusqu'à bâtir un cluster. De plus, l'ajout des spins au cluster se fait suivant la probabilité $P_{add}=1-e^{-2\beta J}$. On répète le processus jusqu'à ce qu'aucun spin ne s'ajoute. Ensuite, le cluster est flippé. L'avantage de la méthode Wolff est que dans cet algorithme un seul cluster est construit et peut générer un grand nombre de clusters afin d'obtenir de bonnes statistiques [51]. Cependant, en s'approchant du point critique, le cluster connecté peut être très grand et le nombre d'opérations pour trouver les sites à joindre en une seule étape peut donc augmenter.

Il faut donc suffisamment de temps pour générer chaque amas critique à partir des différents spins du réseau étudié [51].

Algorithme de Wolff

1. On choisit un spin m au hasard
2. Voir s'il existe un spin voisin qui possède le même signe et l'ajouter au cluster avec une probabilité $P_{add}=1-e^{-2\beta J}$.

3. Pour chaque spin ajouter au cluster, examiner ses voisins qui ont le même signe que lui et les ajouter au cluster selon la probabilité $P_{\text{add}}=1-e^{-2\beta J}$.
 4. Répéter l'étape 3 jusqu'à qu'aucun spin ne soit ajouté.
 5. Flipper le cluster.
 6. Retour à l'étape 1.
-

I.10.3 Algorithme de Swendsen-Wang

Après l'algorithme de Monte Carlo Metropolis (1953), vient l'algorithme de Swendsen-Wang (1987) [54]. En effet, cet algorithme se base sur le flippe des amas (clusters). L'idée essentielle a été inspirée du travail de Fortuin-Kesteleyn (1972) [55]. L'algorithme Swendsen-Wang ressemble à celui de Wolff, l'ensemble du réseau de spin est divisé en clusters. En effet, on lie les spins voisins de même état avec la probabilité $P_{\text{add}}=1-e^{-2\beta J}$. Les mêmes étapes de l'algorithme de Wolff sont répétées, sauf que tous les clusters sont flippés avec une probabilité 1/2. D'autre part, pour chaque cluster flippé, une décision est prise pour que le flip soit accepté ou pas. La probabilité considérée est de 1/2. La mise à jour de tous les sites du réseau se fait après chaque mouvement. Pour mesurer le temps de corrélation, on mesure le nombre d'étapes Monte Carlo et non pas le nombre d'étapes par site comme dans le cas Metropolis. En effet, l'algorithme de Swendsen-Wang est similaire à celui de Metropolis à faible température. Par contre, il reste principalement identique à l'algorithme de Wolff à haute température. Un inconvénient de la méthode de Swendsen-Wang est le grand effort nécessaire pour la détermination de l'amas qui comprend les petits et les grands clusters. Malgré cela, le petit cluster ne contribue pas au ralentissement critique. De ce fait, cette contribution ne permet pas l'accélération du programme. Ce problème a été résolu dans l'algorithme de Wolff. Cependant ce dernier est deux fois plus rapide que celui de Swendsen-Wang [19, 43, 44, 48, 51].

Algorithme de Swendsen-Wang

1. On choisit un spin m au hasard

2. Voir s'il existe un spin voisin qui possède le même signe et l'ajouter au cluster avec une probabilité $P_{add}=1-e^{-2\beta J}$.
 3. Pour chaque spin ajouter au cluster, examiner ses voisins qui ont le même signe que lui et les ajouter au cluster selon la probabilité $P_{add}=1-e^{-2\beta J}$.
 4. Répéter 3 jusqu'à ce qu'aucun spin ne sera ajouté.
 5. Flipper le cluster avec une probabilité 1/2.
 6. Retour à l'étape 1.
-

I.10.4 Algorithme de Niedermayer

Un autre algorithme de cluster a été proposé par Ferenc Niedermayer (1988) [56]. En effet, cet algorithme est une extension de l'algorithme de Wolff et de Swendsen-Wang et s'applique à tous les types de modèles. De plus, l'algorithme de Niedermayer utilise deux probabilités : la première lie deux spins voisins parallèles, tandis que la deuxième lie deux spins antiparallèles. Dans le cas du modèle d'Ising, par exemple, l'énergie de liaison d'une paire s'écrit :

$$E_{ij} = - J_S i S_j \quad (I.43)$$

La probabilité de créer un lien entre deux spins voisins en fonction de cette énergie $P_{add}(E_{ij})$. De plus, dans le modèle d'Ising, l'énergie E_{ij} prend deux valeurs $+J$ ou $-J$. On a donc deux valeurs de $P_{add}(E_{ij})$:

$$P_{add}(-J) = 1-e^{-2\beta J} \quad \text{et} \quad P_{add}(J) = 0 \quad (I.44)$$

D'autre part, pour tout choix de la probabilité P_{add} , l'algorithme de Niedermayer satisfera à la condition d'ergodicité sauf pour $P_{add}(E) = 1$ quel que soit E . D'autre part, le renversement d'une succession de ces clusters permet de passer d'un état à un autre dans un nombre fini de transitions, et d'appliquer la condition de la balance détaillée dans cet algorithme.

Aux bords, il existe des paires de spins parallèles notés m et des spins antiparallèles notés n .

La probabilité est définie comme suit : $[1 - P_{add}(-J)]^m [1 - P_{add}(J)]^n$.

Dans le sens opposée, la probabilité devient : $[1 - P_{\text{add}}(-J)]^n [1 - P_{\text{add}}(J)]^m$ [56].

Comme dans l'algorithme de Wolf, le passage de l'état a à l'état b est :

$$E_b - E_a = 2J (m-n) \quad (\text{I.45})$$

La balance détaillée est examinée par le taux d'acceptation :

$$\frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} = \left[e^{2\beta J} \frac{1 - P_{\text{add}}(-J)}{1 - P_{\text{add}}(J)} \right]^{n-m} \quad (\text{I.46})$$

P_{add} est choisie de façon à satisfaire :

$$\frac{1 - P_{\text{add}}(-E)}{1 - P_{\text{add}}(E)} = e^{-2\beta J} \quad (\text{I.47})$$

La solution de Niedermayer de cette équation s'écrit : $P_{\text{add}}(E) = 1 - e^{[\beta(E-E_0)]}$ avec E_0 choisie de façon arbitraire.

Cependant, la probabilité $P_{\text{add}}(E)$ est censée être positive. En outre, entre les sites i et j, la probabilité s'écrit :

$$P_{\text{add}}(E_{ij}) = \begin{cases} 1 - e^{\beta(E_{ij}-E_0)} & \text{si } E_{ij} \leq E_0 \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{I.48})$$

Ceci définit l'algorithme Niedermayer, qui peut être résumé comme suit [56] :

Si $E_{ij} \leq E_0$ quels que soient i et j, on peut supposer que les taux d'acceptation sont égaux à 1. Ceci revient à chercher la valeur maximale de E_{ij} . Pour le modèle d'Ising la valeur maximale est J.

En augmentant la valeur de E_0 au-dessus de J, la probabilité $P_{\text{add}}(E_{ij})$ est proche de la valeur 1 et donc le cluster devient de plus en plus grand. Cela permet de contrôler la taille des clusters formés par cet algorithme.

Si on choisit une valeur de E_0 inférieure à la valeur maximale de E_{ij} , on ne peut pas choisir un taux d'acceptation égal à 1. Dans ce cas, pour le modèle d'Ising on choisit $-J \leq E_0 < J$, on aura donc :

$$\frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} = \left[e^{2\beta J} e^{-\beta(J+E_0)} \right]^{n-m} = \left[e^{\beta(J-E_0)} \right]^{n-m} \quad (\text{I.49})$$

Pour que l'algorithme obéisse à la balance détaillée, on doit choisir un taux d'acceptation égal à 1, tandis que l'autre obéira à cette équation.

Si on choisit une valeur de E_0 inférieure à la valeur minimale de E_{ij} , cette valeur c'est $-J$ du modèle Ising. Alors, on aura $P_{add}(E_{ij}) = 0$ et le taux d'acceptation est donc donné par :

$$\frac{A(a \rightarrow b)}{A(b \rightarrow a)} = [e^{2\beta J}]^{n-m} \quad (I.50)$$

En variant E_0 , l'algorithme de cluster de Niedermayer inclut l'algorithme de Metropolis et l'algorithme de Wolff, et interpole légèrement de l'un à l'autre.

I.11 Equilibre et grandeurs physiques

I.11.1 Introduction

Le programme de simulation Monte Carlo prend suffisamment de temps pour atteindre l'équilibre. Dans ce cas, le temps est défini par l'étape Monte Carlo. Quand l'équilibre est atteint, la valeur estimée des grandeurs physiques telles que l'aimantation, la polarisation et la susceptibilité, sera calculée dans la nouvelle période.

I.11.2 Equilibre

Pour déterminer l'étape Monte Carlo à l'équilibre, l'évolution d'une quantité physique suivie, change d'abord, puis se stabilise à l'équilibre pour n'afficher que les fluctuations.

Dans certains cas, le système est maintenu dans un minimum d'énergie local. Pour empêcher cela, on recommence à partir des différentes configurations initiales [9].

I.11.3 Grandeurs physiques

Pour les modèles de Spin tels que le modèle d'Ising, de Blume Capel, ou de Blume-Emery-Griffiths nous pouvons calculer certaines grandeurs magnétiques et diélectriques intéressantes telles que l'aimantation, la polarisation, les susceptibilités magnétique et diélectrique.

Les propriétés magnétiques sont obtenues en appliquant le champ magnétique extérieure H :

Les aimantations partielles (M_S et M_σ) et totale (M_{tot}) sans dilution (cas pure) des structures à spins mixte (S et σ) sont données par les expressions suivantes :

$$M_S = \frac{1}{N_S} \sum_i S_i \quad (I.51)$$

$$M_\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \sum_j \sigma_j \quad (I.52)$$

$$M_{\text{tot}} = \frac{N_S M_S + N_\sigma M_\sigma}{N_S + N_\sigma} \quad (\text{I.53})$$

Les aimantations avec dilution sont données par :

$$M_S = \frac{1}{P_S N_S} \sum_i \varepsilon_i S_i \quad (\text{I.54})$$

$$M_\sigma = \frac{1}{P_\sigma N_\sigma} \sum_j \varepsilon_j \sigma_j \quad (\text{I.55})$$

$$M_{\text{tot}} = \frac{P_S N_S M_S + P_\sigma N_\sigma M_\sigma}{P_S N_S + P_\sigma N_\sigma} \quad (\text{I.56})$$

Le coefficient ε_i est une variable aléatoire désactivée, non corrélée, qui prend la valeur 1 avec la probabilité P pour l'atome magnétique ou 0 avec probabilité $1-P$ pour l'atome non-magnétique.

Les susceptibilités partielles (χ_S et χ_σ) et totale (χ_{tot}) sans dilution (cas pure) sont données par :

$$\chi_S = \beta (\langle M_S^2 \rangle - \langle M_S \rangle^2) \quad (\text{I.57})$$

$$\chi_\sigma = \beta (\langle M_\sigma^2 \rangle - \langle M_\sigma \rangle^2) \quad (\text{I.58})$$

$$\chi_{\text{tot}} = \frac{N_\sigma \chi_\sigma + N_S \chi_S}{N_\sigma + N_S} \quad (\text{I.59})$$

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

On note que $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et la température absolue est notée T .

K_B est la constante de Boltzmann qui prend la valeur 1.

La susceptibilité totale avec dilution est donnée par :

$$\chi_{\text{tot}} = \frac{P_S N_S \chi_S + P_\sigma N_\sigma \chi_\sigma}{P_S N_S + P_\sigma N_\sigma} \quad (\text{I.60})$$

Tandis que les propriétés diélectriques sont obtenues en appliquant un champ électrique extérieur E :

Les polarisations partielles (P_S et P_σ) et totale (P_{tot}) à spins mixte sont données par les relations suivantes :

$$P_S = \frac{1}{N_S} \sum_i S_i^Z \quad (I.61)$$

$$P_\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \sum_j \sigma_j^Z \quad (I.62)$$

$$P_{tot} = \frac{N_S P_S + N_\sigma P_\sigma}{N_S + N_\sigma} \quad (I.63)$$

Les susceptibilités diélectriques partielles (χ_S et χ_σ) et totales (χ_{tot}) sont données par :

$$\chi_S = \beta (\langle P_S^2 \rangle - \langle P_S \rangle^2) \quad (I.64)$$

$$\chi_\sigma = \beta (\langle P_\sigma^2 \rangle - \langle P_\sigma \rangle^2) \quad (I.65)$$

$$\chi_{tot} = \frac{N_\sigma \chi_\sigma + N_S \chi_S}{N_\sigma + N_S} \quad (I.66)$$

I.12 Propriétés hystérétiques

I.12.1 Structure des domaines magnétiques

Les matériaux magnétiques possèdent des régions ou domaines uniformément aimantées. En effet, deux domaines adjacents sont séparés par des couches où se passe la transition appelée paroi. De plus, les matériaux magnétiques présentent au sein des domaines magnétiques (connus aussi comme les domaines de Weiss) d'une part des moments magnétiques ordonnés où l'aimantation totale est non nulle ($M_{tot} \neq 0$) et d'autre part des moments magnétiques désordonnés où l'aimantation totale est nulle ($M_{tot} = 0$) [22,57,58].

Dans la partie qui suit, nous allons énoncer les principes physiques essentiels pour la compréhension du comportement du domaine de Weiss et les parois dans les systèmes macroscopiques.

Domaines de Weiss

Le domaine magnétique ou domaine de Weiss, se forme quand les moments magnétiques des matériaux sont orientés dans la même direction telle que dans les matériaux ferromagnétiques,

antiferromagnétiques et ferrimagnétiques. En effet, les domaines de Weiss sont des régions qui ont le même ordre magnétique dans un matériau.

Les régions sont séparées par des parois appelées parois de domaine [58, 59]. Les moments magnétiques au sein d'un même domaine de Weiss s'alignent dans la même direction, et donnent une aimantation nette. Tandis que les autres domaines donnent des aimantations différentes (Fig. I.14).

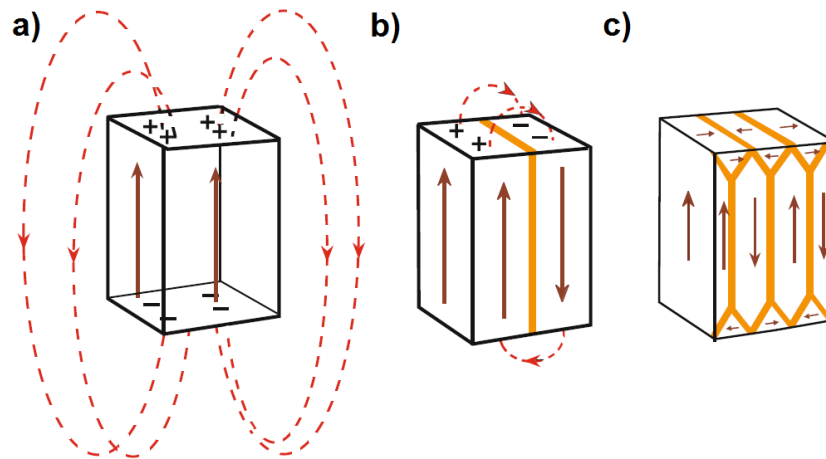


Fig. I.14 : Différentes structures de domaines pour un matériau ferromagnétique : la structure mono-domaine (a), la structure possédant deux domaines (b) et enfin la structure de domaines de fermeture (c) [8, 59].

La structure mono-domaine, telle que représentée sur la Fig. I.14.a, crée un champ magnétique H et minimise les énergies d'échange et d'anisotropie tandis que l'énergie dipolaire est importante. Ceci est dû à ce que les pôles sont écartés les uns des autres. En effet, pour diminuer l'énergie dipolaire, le matériau peut se décomposer en deux domaines magnétiques avec une aimantation de signe opposée (Fig. I.14.b). De plus, les lignes de champs créent une boucle d'un domaine magnétique à un autre et sont de directions opposées, diminuant le champ à l'extérieur du matériau.

Pour diminuer encore le champ, on divise chacun des domaines pour obtenir des petits domaines parallèles plus petits avec une aimantation dans différentes directions. Ce qui annule les pôles et donc le champ magnétique à l'extérieur du matériau est annulé, (Fig. I.14.c). Des structures à domaine fermé peuvent être conçues pour minimiser l'énergie dipolaire [59]. En considérant le coût énergétique résultant de la formation des parois des domaines magnétiques, une stabilité est atteinte entre l'énergie dipolaire et le coût énergétique des parois de ces domaines [8].

Paroi magnétique

Un matériau magnétique présente plusieurs domaines de directions différentes séparés par des parois entre eux. En effet, la création de ces domaines magnétiques de directions opposées permet au matériau d'abaisser son énergie dipolaire. De plus, l'énergie de la paroi de domaine magnétique est obtenue en calculant la différence entre les moments magnétiques avant et après la création de la paroi. La valeur de cette énergie est donnée généralement par unité de surface de la paroi [57, 60]. Lorsque chaque moment magnétique est aligné avec l'axe du réseau cristallin, l'énergie anisotrope est minimale, ce qui réduit la largeur de la paroi du domaine [24]. Tandis que lorsque les moments magnétiques sont alignés parallèlement les uns aux autres, l'énergie d'échange diminue, et les parois du domaine magnétique deviennent plus épaisses à cause de la répulsion des domaines. Selon l'angle formé par deux aimantations de domaines adjacents, il existe deux types de murs de domaine.

La Fig. I.15.a montre une paroi de domaine magnétique à 90° séparant deux domaines entre eux. La direction verticale de la paroi du domaine magnétique correspond à la demi-droite qui coupe un angle en deux angles égaux. Cette bissectrice est entre les directions de l'aimantation des domaines voisins. De plus, comme le montre la Fig. I.15.b, une paroi de domaine à 180° sépare deux domaines dont les aimantations sont antiparallèles [24].

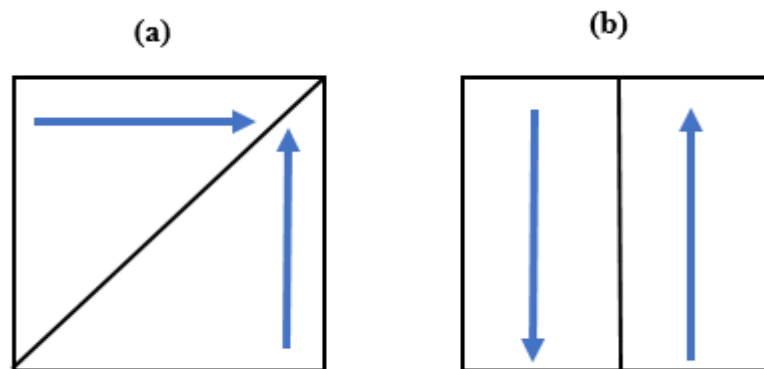


Fig. I.15: Paroi de domaine à 90° (a), paroi de domaine à 180° (b) [8, 59].

Paroi de Bloch

Les domaines de Weiss sont séparés les uns des autres par des parois appelées parois de Bloch. Dans cette paroi, les moments magnétiques passent progressivement d'un domaine de Weiss à

un autre, dans le plan de la paroi. Dans la paroi de Bloch, la rotation de l'aimantation se produit dans un plan parallèle à celui de la paroi de domaine (Fig. I.16).

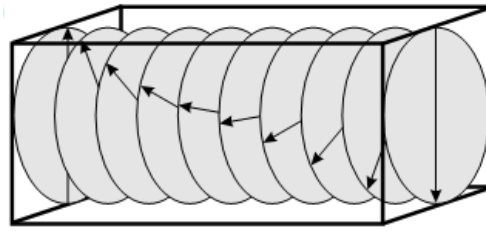


Fig. I.16 : Rotation de l'aimantation dans une paroi de Bloch [8, 59].

Dans la paroi de Néel, la rotation du vecteur d'aimantation se fait dans un plan perpendiculaire à celui de la paroi de domaine (Fig. I.17).

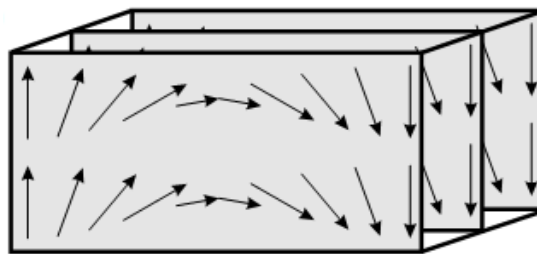


Fig. I.17 : Rotation de l'aimantation dans une paroi de Néel [8, 59].

Une paroi de Néel est une paroi dans laquelle l'aimantation tourne tout en restant parallèle à la surface du matériau dans laquelle elle se trouve (Fig. I.18). En effet, cela se produit généralement dans les systèmes de couches minces ferromagnétiques [24]. De plus, la paroi de Néel est adaptée énergétiquement dans les systèmes composés de couches minces. La paroi de Néel présente seulement une petite épaisseur d avec une aimantation dans le plan.

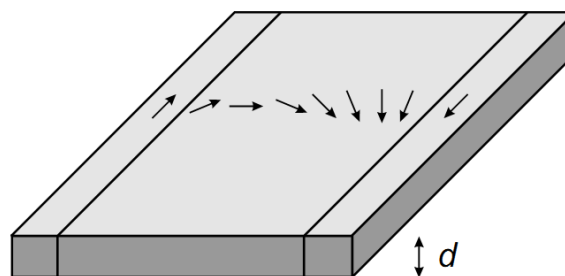


Fig. I.18 : Paroi de Néel dans les systèmes de couches minces [8, 59].

I.12.2 Cycles d'hystérésis

Les cycles d'hystérésis magnétiques sont un phénomène dans lequel l'aimantation provoquée par le champ magnétique ne dépend pas seulement de l'intensité du champ appliqué mais aussi des états magnétiques antérieurs du corps aimanté. Dans ce cycle, la variation de l'aimantation est représentée en fonction du champ magnétique appliqué. De plus, le cycle d'hystérésis est étudié pour différents matériaux magnétiques.

Dans la partie qui suit, nous discutons les détails de la courbe de première aimantation et le cycle magnétique d'hystérésis.

Courbe de première aimantation

Lorsqu'on applique un champ magnétique extérieur H à un matériau ferromagnétique démagnétisé, l'aimantation nette du matériau augmente. En effet, cette augmentation dépend de l'orientation du champ externe par rapport à l'orientation de chaque domaine magnétique de la structure du matériau, de l'anisotropie et de la géométrie du matériau étudié. Les différentes étapes que subit la première aimantation sont reportées sur la Fig. I.19 [58, 61].

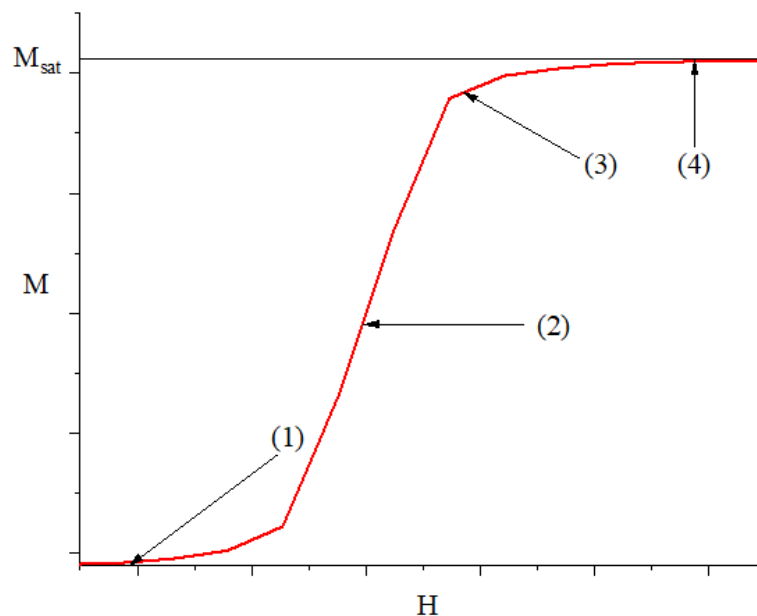


Fig. I.19: Courbe de première aimantation [8].

Dans cette courbe, on peut distinguer quatre différentes régions 1, 2, 3 et 4.

Région (1) : c'est le début de la courbe aimantation et les parois de Bloch qui séparent les domaines magnétiques se déplacent. Cette partie de la courbe montre une augmentation de l'aimantation en appliquant un champ magnétique extérieur à un matériau démagnétisé. Cependant, en annulant le champ appliqué, l'aimantation revient à sa valeur initiale nulle [61].

Région (2) : Dans cette région, les déplacements des parois de Bloch séparant les domaines magnétiques sont irréversibles. De plus, l'aimantation nette dans cette région augmente de telle sorte que les parois de Bloch vont occuper de nouveaux emplacements et ne peuvent plus reprendre leur état initial.

Région (3) : Cette région est connue à la fois comme la phase de déplacement des parois de domaine irréversible et de rotation des aimantations des domaines. De plus, en appliquant le champ magnétique externe, l'aimantation nette augmente.

Région (4) : C'est la région finale où l'aimantation du matériau se rapproche pour atteindre sa valeur de saturation [61].

1.12.3 Paramètres caractéristiques des cycles d'hystérésis

Les cycles d'hystérésis sont d'une grande importance dans le domaine des matériaux. Ils servent à caractériser les matériaux magnétiques ou électriques. Ces cycles nous permettent d'avoir des informations sur les matériaux telles que : le champ coercitif H_C , l'aimantation rémanente M_r et l'aimantation de saturation M_s . Ces propriétés dépendent de plusieurs facteurs tels que la structure du matériau, l'intensité du champ magnétique extérieur appliqué au système, les défauts microscopiques et les propriétés thermiques.

Nous définissons les paramètres du cycle d'hystérésis comme suit :

Champ de saturation (H_s)

C'est la valeur minimale du champ magnétique extérieur appliqué qui permet à l'aimantation du matériau d'atteindre sa valeur de saturation (M_s) [59].

Aimantation de saturation (M_s)

Dans ce cas tous les moments magnétiques sont orientés suivant le champ magnétique appliqué et l'aimantation du matériau prend sa valeur maximale [59].

Aimantation rémanente (M_r)

En réduisant la valeur du champ magnétique appliqué à zéro après saturation, on obtient l'aimantation rémanente M_r . Dans ce cas, certains moments magnétiques restent orientés dans la direction du champ magnétique extérieur appliqué du fait du blocage des parois de Bloch [59].

Champ coercitif (H_c)

Le champ coercitif est obtenu en appliquant le champ magnétique extérieur dans le sens opposé au champ de saturation (H_s), afin de diminuer l'aimantation du matériau à zéro pour démagnétiser le matériau.

Toutes ces propriétés sont très importantes dans les applications magnétiques [58].

Cycle d'hystérésis

Dans les matériaux ferromagnétiques, les cycles d'hystérésis magnétiques donnent le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ magnétique externe H , mettant en évidence le champ coercitif magnétique H_c , le champ de saturation H_s , l'aimantation de rémanente et enfin l'aimantation de saturation (Fig. I.20).

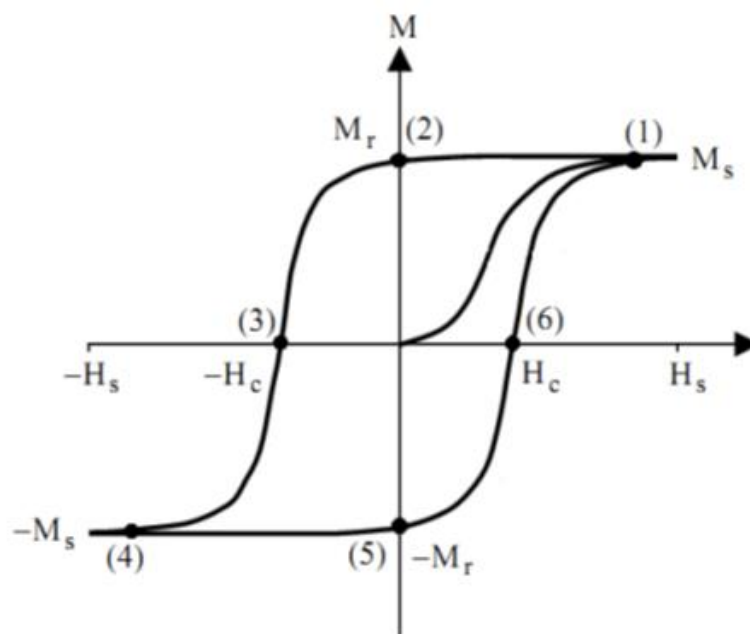


Fig. I.20 : Représentation d'un cycle d'hystérésis magnétiques montrant le retournement des parois séparant les domaines magnétiques [8].

Sur la Fig. I.20, on remarque six points différents :

Au point (1), l'aimantation subit un champ de saturation H_s on parle alors d'une aimantation de saturation M_s où tous les domaines magnétiques sont alignés suivant le sens du champ magnétique extérieur appliqué H .

En passant du point (1) vers le point (2), le champ magnétique extérieur s'annule ($H=0$). Dans ce cas, on parle de l'aimantation rémanente M_r .

En passant du point (2) vers le point (3), le champ magnétique est négatif et l'aimantation décroît pour arriver au point (3) où elle s'annule. Il s'agit donc d'un champ coercitif négatif ($H_C < 0$) au point (3).

Entre le point (3) et le point (4), la valeur du champ magnétique augmente dans le sens négatif, l'aimantation subit un champ de saturation négatif ($H_s < 0$), on parle à nouveau d'une aimantation de saturation au point (4) mais cette fois-ci inversée ($M_s < 0$).

En passant du point (4) au point (5), le champ magnétique extérieur s'annule et le matériau devient donc aimanté sans champ.

En augmentant le champ magnétique extérieur, mais cette fois-ci pour les valeurs positives, l'aimantation croît pour arriver au point (6) où elle s'annule. On assiste donc à un champ coercitif positif ($H_C > 0$), pour enfin atteindre le point de saturation. On obtient ainsi le cycle magnétique d'hystérésis.

En outre, Il convient de mentionner qu'il existe une relation étroite entre les propriétés électriques et magnétiques des nanomatériaux. Au début, on peut réaliser les phénomènes électriques à partir du concept de magnétisme. En effet, il existe une grande similitude entre l'électricité et les quantités magnétiques telles que la polarisation et l'aimantation. Mais une différence importante entre eux est que leurs champs externes sont distincts, l'un correspond à l'application d'un champ électrique E (cycle électrique d'hystérésis) tandis que l'autre est relatif à l'application du champ magnétique H (cycle magnétique d'hystérésis) [62].

I.12.4 Matériaux magnétiques durs et doux

Les matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques sont généralement classés selon la largeur de leur cycle d'hystérésis magnétique en deux catégories : les matériaux magnétiquement doux

et les matériaux magnétiquement durs, dont les différentes caractéristiques et applications sont décrites ci-dessous :

Matériaux durs

On distingue les matériaux magnétiques durs (ferromagnétiques ou ferrimagnétiques) par la largeur du cycle d'hystérésis magnétique et les valeurs élevées du champ coercitif ($H_C > 10000$ A/m) et de l'aimantation rémanente (M_r) (Fig. I.21).

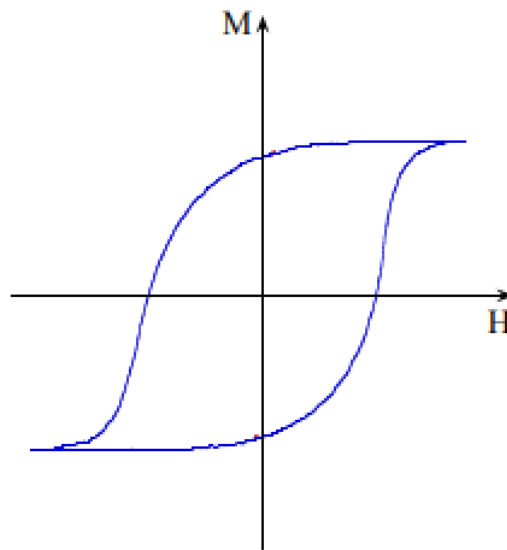


Fig. I.21: Cycle d'hystérésis magnétique d'un matériau ferromagnétique dur.

Les matériaux durs sont donc difficiles à magnétiser et à démagnétiser [57]. Pour cela, ils sont surtout utilisés pour la fabrication d'aimants permanents. Un exemple des matériaux durs c'est l'aimant samarium-cobalt (Sm-Co) avec une coercivité $H_C = 500$ kA/m. De plus, plusieurs applications grâce aux aimants permanents ont été faites. On retrouve ces matériaux durs dans les générateurs, les moteurs électriques, les aimants du réfrigérateur, les instruments galvanométriques, les dynamos, les haut-parleurs.

Matériaux doux

Les matériaux magnétiques doux (ferromagnétiques ou ferrimagnétiques) ont une petite largeur du cycle d'hystérésis magnétique et des petites valeurs du champ coercitif ($H_C < 1000$ A/m) tandis que de l'aimantation rémanente (M_r) est importante (Fig. I.22).

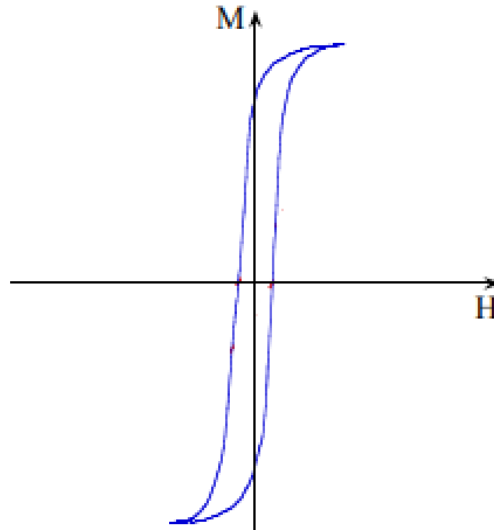


Fig. I.22 : Cycle d'hystérésis magnétique d'un matériau ferromagnétique doux.

Un exemple des matériaux doux est l'aimant du ferro-silicium (Fe-Si) avec une coercivité $H_C=8$ A/m. De plus, les matériaux doux sont faciles à magnétiser et à démagnétiser. Ces matériaux sont composés de fer, cobalt, nickel, magnésium, molybdène et silicium [61] et ils sont utilisés dans les bobines des transformateurs, les générateurs, les moteurs.

I.13 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les propriétés magnétiques des matériaux et leurs classification et comportements. Ces matériaux suscitent un grand intérêt de la part de la communauté scientifique du fait de leurs grands champs d'applications. Parmi les propriétés magnétiques, on distingue l'aimantation et la susceptibilité qui constituent des grandeurs d'une grande importance. D'autre part, nous avons aussi présentés les principes de base pour comprendre le principe des simulations de Monte Carlo. De plus, nous nous sommes intéressés aux algorithmes d'échantillonnage les plus utilisés et nous avons présenté les différents modèles de spins utilisés en magnétisme. Enfin, nous avons exposé les cycles d'hystérésis et leurs différents composants.

CHAPITRE II : Etude par le modèle de Blume-Capel des nanostructures de type graphyne, stanene et naphthalène par l'interaction RKKY : Simulations de Monte Carlo

II.1 Modèle de Blume-Capel appliqué à une structure graphyne bicouche avec l'interaction RKKY : simulations Monte Carlo

II.1.1 Introduction

Le graphyne est l'un des matériaux bidimensionnels, composé d'atomes de carbone liés par des liaisons sp^2 qui, pour le moment, n'a pas été synthétisé en quantité suffisante pour être étudié mais il a été prédit par des modèles informatiques. La structure du graphyne est plus flexible que celle du graphène, ce qui donne la possibilité d'en construire des nanotubes. Des recherches théoriques ont montré que la structure du graphyne présente de bonnes propriétés thermiques [63] et électroniques [64].

Dans ce travail, nous considérons un système constitué d'une structure de graphyne magnétique bicouche, avec des spins mixtes $\sigma=\pm 3/2$ et $S=\pm 1$, séparés par des plans non magnétiques. L'interaction entre les spins des deux couches est régie par le couplage d'échange RKKY (Ruderman Kittel-Kasuya-Yoshida) [65,66]. Pour étudier numériquement ce système, nous utilisons la technique de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis.

II.1.2 Présentation du système et de l'hamiltonien

La structure de graphyne à deux plans considérés ici est étudiée sous les conditions aux limites libres. Le système est constitué de deux plans A et B à spins mixtes $\sigma=\pm 3/2$ et $S=\pm 1$, séparés par un nombre L de couches non magnétiques. Un tel système contient un nombre N_S (atomes de spin S) = N_σ (atomes de spin σ) = 108 atomes (voir Fig. 2.1). Plusieurs algorithmes ont été développés pour générer des statistiques de séquence aléatoire, mais aucun n'a atteint la popularité de l'algorithme de Metropolis et al. [50]. Nous avons généré un calcul de Monte Carlo de 10^5 itérations. Pour atteindre cet équilibre, nous éliminons les 10^4 premières étapes des simulations.

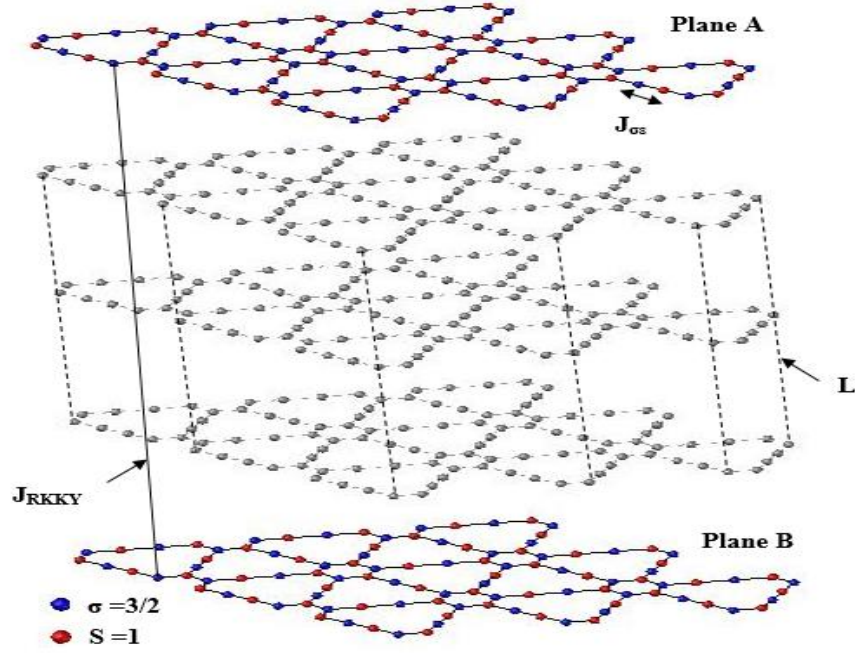


Fig. II.1 : Représentation schématique des deux plans de graphyne magnétiques séparés par des couches non-magnétiques (L).

L'hamiltonien du système étudié est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{\sigma S} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - J_{RKKY}^{\sigma} \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} \sigma_i \sigma_j - J_{RKKY}^S \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} S_i S_j - H \left(\sum_i \sigma_i + \sum_j S_j \right) - D_{\sigma} \sum_j \sigma_j^2 - D_S \sum_i S_i^2 \quad (\text{II.1})$$

Où $J_{\sigma S}$ est le couplage d'échange magnétique entre les atomes de spin σ et S au sein des plans magnétiques A et B ($J_{\sigma S} < 0$). J_{RKKY}^{σ} est l'interaction de couplage d'échange entre les spins σ du plan A et les spins σ du plan B, alors que J_{RKKY}^S décrit l'interaction entre les spins S du plan A avec les spins de même type du plan B. Par ailleurs, H et D définissent respectivement le champ magnétique extérieur et le champ cristallin.

Pour simplifier nos calculs, nous avons pris : $J_{RKKY} = J_{RKKY}^{\sigma} = J_{RKKY}^S$.

Où l'interaction J_{RKKY} est donnée par :

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

Le paramètre a est la constante du réseau, J_0 représente la constante de couplage magnétique et K_f le niveau de Fermi pris égal à 0.5. La quantité $a^2 J_0$ est prise égale à 1 comme dans la réf. [67] et L désigne le nombre de couches non-magnétiques.

L'équation (II.2) devient donc :

$$J_{\text{RKKY}} = \frac{1}{L^2} \cos(0.5L) \quad (\text{II.3})$$

II.1.3 Résultats et discussion

Nous rappelons que les résultats sont obtenus par simulation de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. Les résultats sont présentés comme suit : dans la sous-section II.1.3.1, nous étudions les diagrammes de phase à l'état fondamental (pour la température nulle), puis pour les températures non nulles, nous explorons, dans la sous-section II.1.3.2, le comportement des aimantations et des susceptibilités thermiques et l'aimantation totale en fonction du champ cristallin (D) et du champ magnétique extérieur (H).

II.1.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans cette section, nous étudions les diagrammes de phase de l'état fondamental dans deux plans (D, H) et (J_{ss}, D) pour des valeurs fixes des autres paramètres physiques. Premièrement, sur la Fig. II.2.a, nous présentons les configurations stables dans le plan (D, H) pour les valeurs fixes des paramètres $J_{\text{ss}} = -5$ et $L = 3$. On observe clairement sur cette figure que, sur 12 configurations possibles, seules trois configurations sont stables, à savoir : $(-1/2, 0)$, $(+3/2, -1)$, $(-3/2, +1)$. La variation du champ cristallin est responsable de l'apparition de différentes phases pour une valeur fixe du champ magnétique externe H . Les résultats préliminaires ont montré que la variation du nombre de couches L n'affecte pas la topologie des diagrammes de phases. Toutefois, lors de la variation de l'interaction de couplage d'échange J_{ss} , la région occupée par la phase $(+3/2, -1)$ varie de manière significative. D'autre part, nous présentons sur la Fig. II.2.b les configurations stables obtenues dans le plan (J_{ss}, D). Cette figure montre que cinq configurations sont stables : $(-1/2, 0)$, $(+1/2, 0)$, $(+3/2, +1)$, $(+3/2, -1)$, $(-3/2, +1)$. De la même manière que sur la Fig. II.2.a, la variation du nombre de couches L n'influence ni le nombre de phases ni la nature du diagramme dans le plan (J_{ss}, D).

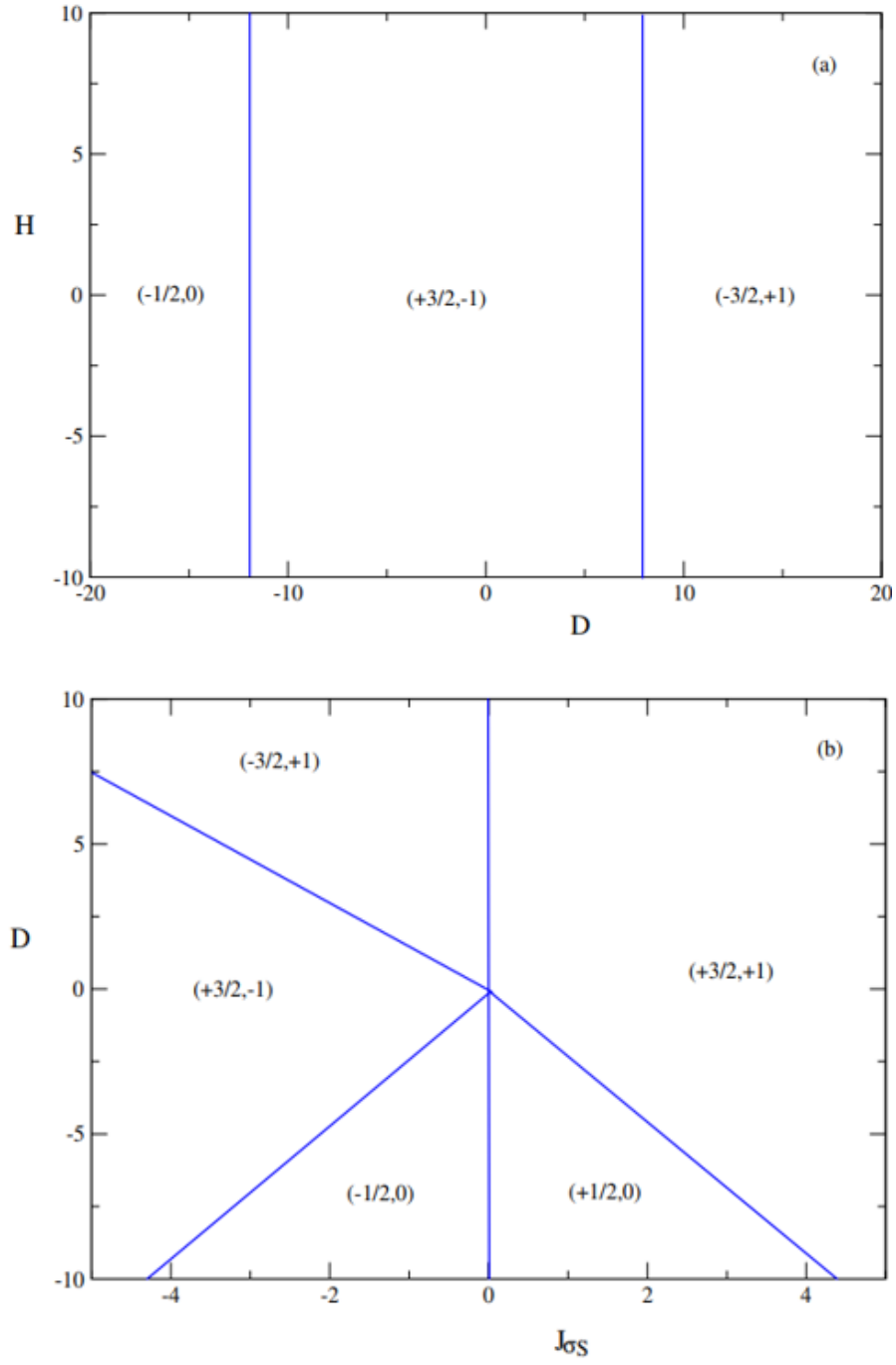
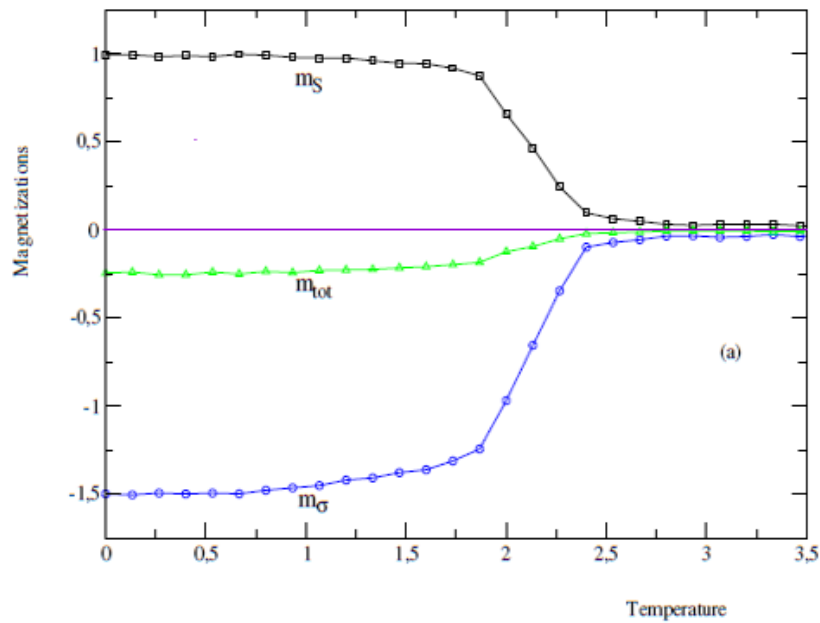


Fig.II.2 : Diagrammes de phases de l'état fondamental du système étudié pour $L=3$: (a) dans le plan (D, H) pour $J_{\sigma s} = -5$, (b) dans le plan $(J_{\sigma s}, D)$ pour $H=0$.

II.1.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans cette sous-section, nous utilisons les simulations de Monte Carlo pour montrer l'effet de l'interaction J_{RKKY} sur les propriétés magnétiques de la structure de graphyne (voir Fig. II.1). Nous présentons sur la Fig. II.3.a le comportement thermique des aimantations partielles (m_s et m_σ) et totale (m_{tot}) en l'absence du champ magnétique externe H et du champ cristallin D . Cette figure est tracée pour une valeur fixe de l'interaction de couplage d'échange $J_{\text{os}} = -1$ et pour un nombre de couches non-magnétiques $L=1$. On observe que les aimantations partielles et totale diminuent jusqu'à la valeur zéro pour une température supérieure à la température de transition $T_r \approx 2$. Sur la Fig. II.3.b, nous rapportons les susceptibilités partielles (χ_s et χ_σ) et totale (χ_{tot}) pour : $H = 0$, $D = 0$, $J_{\text{os}} = -1$ et $L = 1$. Cette figure confirme la valeur de la température de transition ($T_r \approx 2$) correspondant aux pics des susceptibilités.



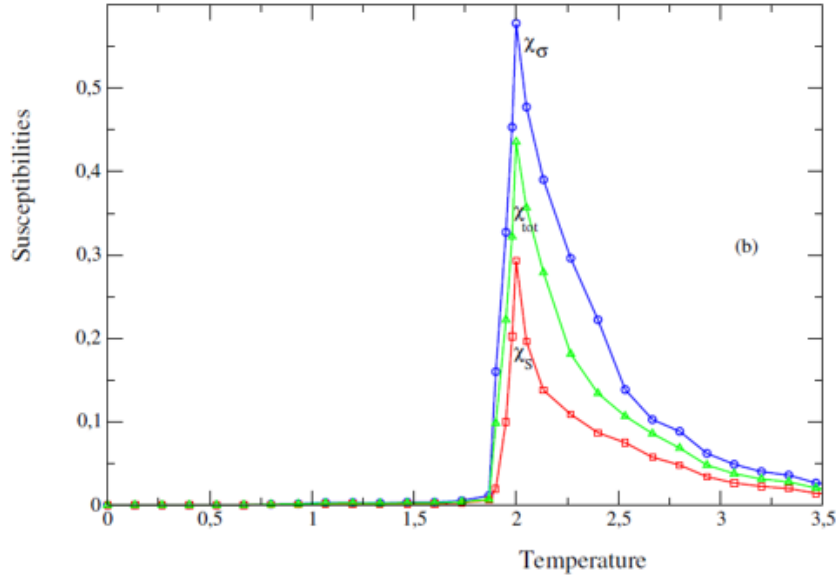


Fig. II.3 : (a) Aimantations et (b) Susceptibilités en fonction de la température pour $J_{\sigma s} = -1$, $L=1$, $H = 0$ et $D = 0$.

Sur la Fig. II.4.a, nous illustrons l'aimantation totale en fonction de la température pour des nombres différents de couches non-magnétiques ($L=1, 2, 3$ et 4), en l'absence du champ magnétique externe H et du champ cristallin D et pour une valeur fixe de l'interaction de couplage d'échange $J_{\sigma s}=-1$. L'augmentation du nombre de couches non-magnétiques (L) diminue la valeur de la température de transition. Ce résultat est confirmé par la Fig. II.4.b, où nous présentons le comportement thermique correspondant aux susceptibilités pour les mêmes paramètres donnés sur la Fig. II.4.a. En effet, les températures de transitions correspondant aux pics de la susceptibilité diminuent lorsque le nombre de couches non-magnétiques augmente. Les températures obtenues pour quatre valeurs de couches non-magnétiques $L=1, 2, 3$ et 4 sont respectivement $T_r \approx 2, 1.4, 1.3$ and 0.65 .

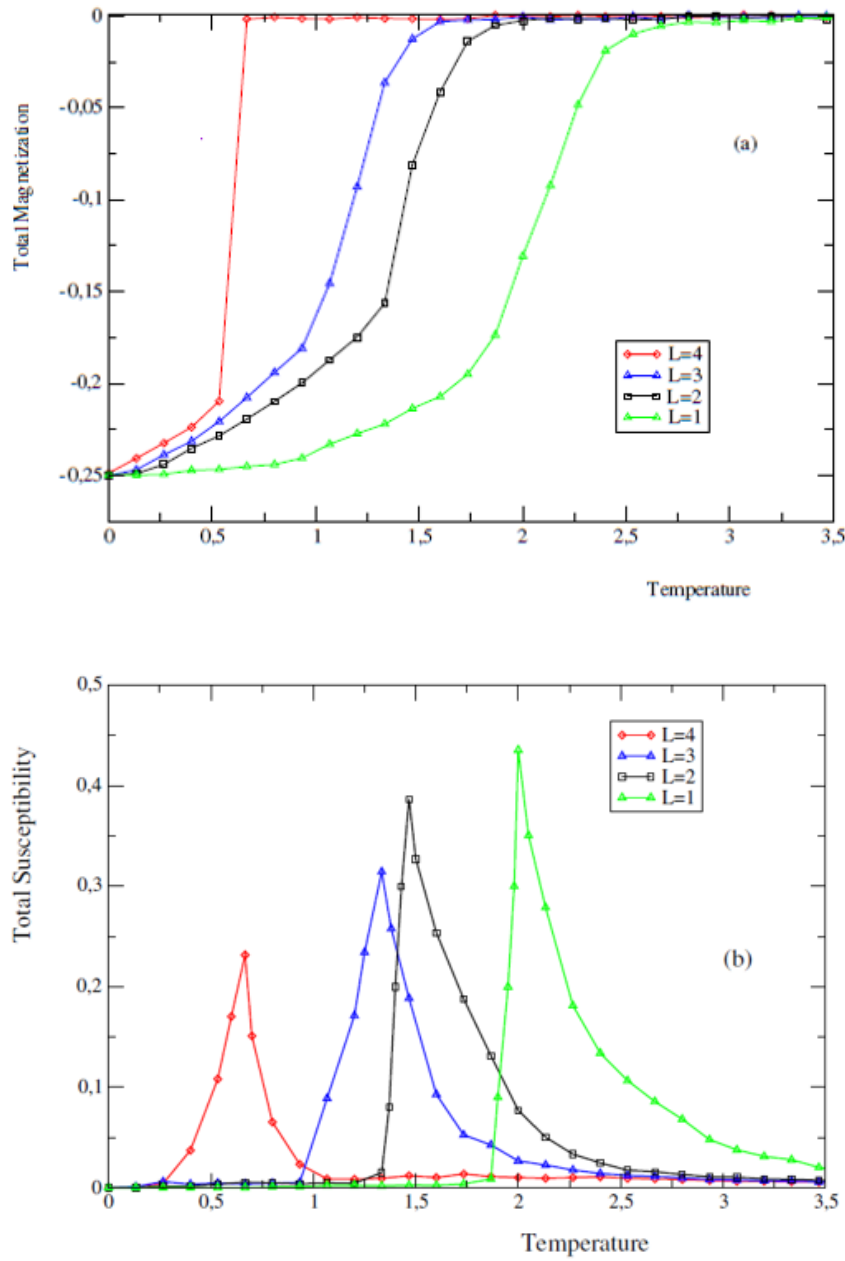
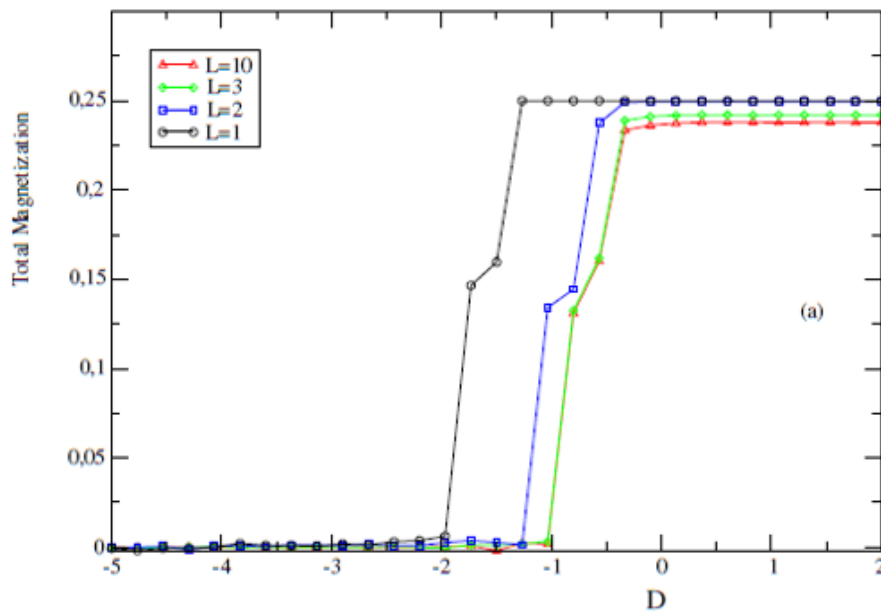


Fig. II.4: (a) Aimantation totale et (b) Susceptibilité totale en fonction de la température pour $L = 1, 2, 3$ et 4 , $J_{os} = -1$, $H = 0$ et $D = 0$.

La Fig. II.5.a illustre l'aimantation totale en fonction du champ cristallin D pour différentes valeurs de couches non-magnétiques ($L = 1, 2, 3$ et 10), en absence du champ magnétique externe ($H=0$), pour une valeur fixe de température $T=0.1$ et pour une valeur du paramètre d'interaction de couplage ferrimagnétique $J_{os}=-1$. Sur cette figure, on remarque que pour $D < -2$, le système subit la phase paramagnétique indépendamment de la valeur du paramètre L . Par ailleurs, la valeur du champ cristallin de transition augmente avec l'augmentation du nombre

de couches non-magnétiques pour atteindre la valeur $D_T = -1$ pour toute valeur de $L \geq 3$. Les paliers qui apparaissent sur la Fig. II.5.a sont attribués aux configurations de spin intermédiaires. De plus, pour $D > -1.5$, les aimantations du système atteignent la valeur de saturation qui diminue légèrement à mesure que le paramètre L augmente.

Sur la Fig. II.5.b, l'aimantation totale est tracée en fonction du champ cristallin pour différentes valeurs de l'interaction de couplage d'échange ferrimagnétique ($J_{\sigma\sigma} = -1, -2, -3, -4$ et -5). Cette figure a été établie en absence du champ magnétique externe ($H=0$), pour $T=0.1$ et pour $L=1$. Pour $D \leq -5$, le système présente la phase paramagnétique pour toute valeur de l'interaction de couplage d'échange $J_{\sigma\sigma}$. Par ailleurs, pour les valeurs négatives et faibles de $J_{\sigma\sigma}$ ($J_{\sigma\sigma} = -1$ et -2), les aimantations totales atteignent la valeur de saturation égale à $+0.25$. Par ailleurs, pour les valeurs négatives et élevées de $J_{\sigma\sigma}$ ($J_{\sigma\sigma} = -3, -4$ et -5), les aimantations totales atteignent la valeur de saturation égale à -0.25 . En outre, l'augmentation des valeurs absolues de $J_{\sigma\sigma}$ permet au système d'atteindre rapidement la saturation.



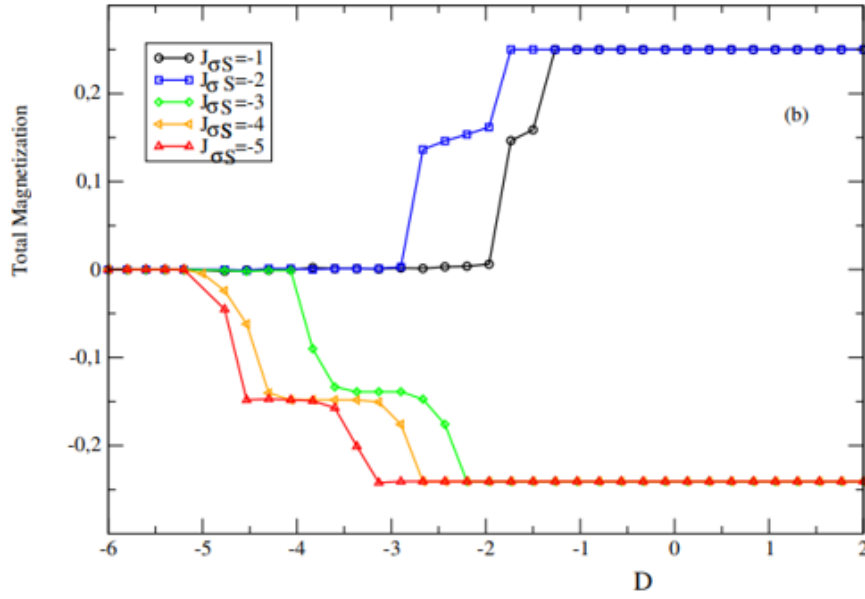


Fig. II.5 : Aimantation totale en fonction du champ cristallin en l'absence du champ magnétique externe et pour $T=0.1$: (a) $J_{\sigma S} = -1$, $L=1, 2, 3$ et 10 , (b) $L=1$, $J_{\sigma S} = -1, -2, -3, -4$ et -5 .

Les Figs. II.6.a et II.6.b montrent le cycle d'hystérésis magnétique en l'absence du champ cristallin ($D=0$) et pour une valeur fixe de l'interaction de couplage d'échange $J_{\sigma S} = -1$. La Fig. II.6.a est présentée pour une couche non-magnétique ($L=1$) et différentes valeurs de température ($T=0.001, 0.5$ et 2). Dans ce cas, l'augmentation de la température diminue les surfaces des boucles. Les cycles d'hystérésis montrent deux phases intermédiaires stables d'aimantation totales (-0.25 et $+0.25$). Des résultats similaires ont été observés par d'autres chercheurs [68-70].

La Fig. II.6.b est établie pour une valeur de température fixe $T=0.001$ et un nombre de couches non-magnétiques ($L=1$ et $L=2$). Dans ce cas, le passage d'une couche non-magnétique à deux couches diminue les boucles de surface. De plus, des calculs préliminaires ont montré que le cycle d'hystérésis ne dépend pas de la valeur de L pour $L \geq 2$. Le même comportement a été observé par les mesures expérimentales de l'hystérésis magnétique et par l'étude du bruit Barkhausen de particules non-magnétiques contenant du fer α [71].

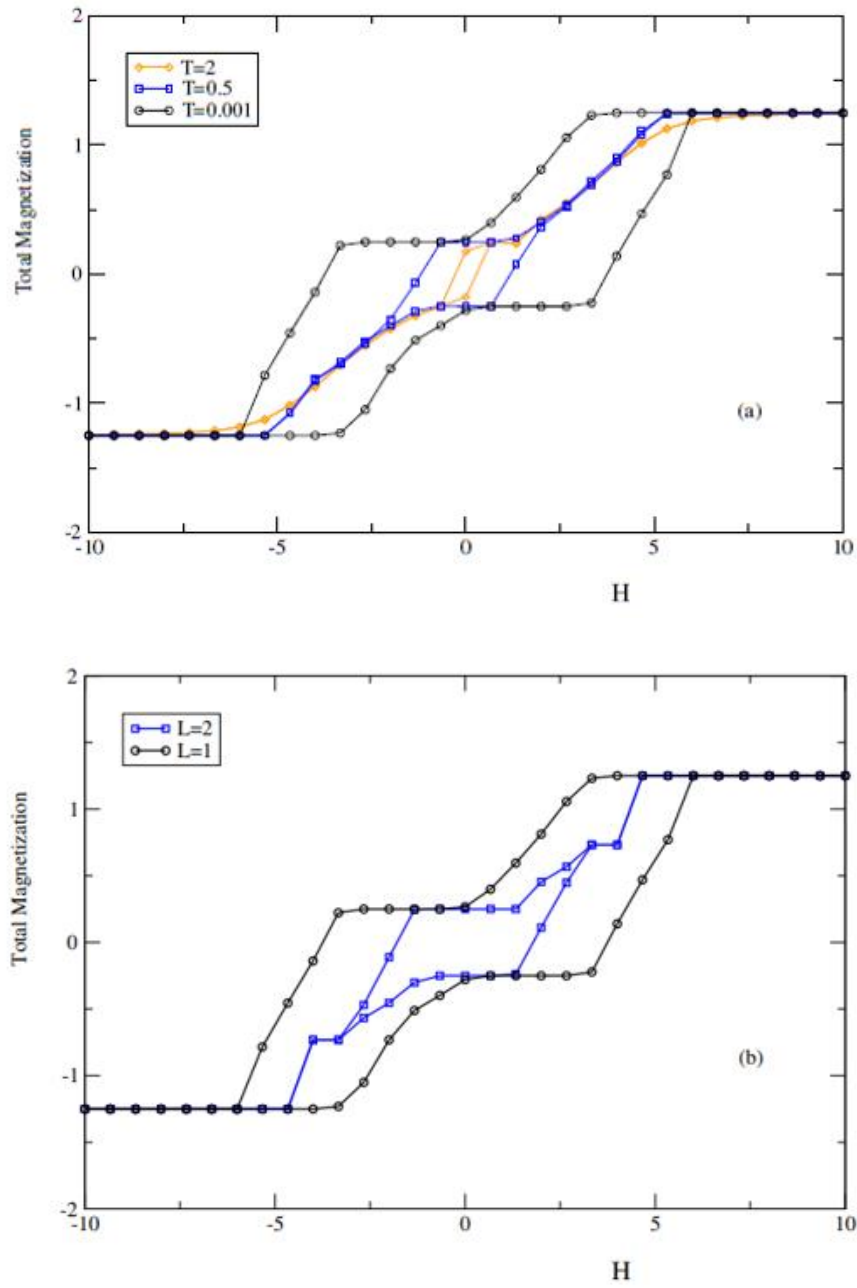


Fig. II.6: Cycles d'hystérésis magnétiques en l'absence de champ cristallin pour $J_{\sigma s}=-1$: Dans (a) pour $L=1$, $T=0.001, 0.5$ et 2 , dans (b) pour $T=0.001$, $L=1$ et 2 .

II.2 Modèle de Blume-Capel d'une structure de type nano-stanene par l'interaction RKKY : simulations de Monte Carlo

II.2.1 Introduction

Le Stanene (qui signifie étain dont le symbole chimique est : Sn) [72] est le nouveau cousin du graphène. Ce matériau à deux dimensions (2D) a suscité un intérêt significatif depuis sa découverte, entraînant un développement dans les matériaux de type 2D [73, 74]. Une de ses propriétés uniques est la grande mobilité des porteurs [75, 76], qui permet aux électrons de se déplacer librement tout en subissant une faible diffusion par les défauts et des impuretés [77]. Le stanene est une monocouche en nid d'abeilles d'atomes d'étain. Il peut être un candidat compétitif du graphène en raison de sa conductivité élevée. De plus, sa structure électrique peut être facilement réglée [78-91]. Par ailleurs, il existe des structures 2D stables en silicium [82, 83], germanium [84] étain [85, 86] elles sont appelées respectivement silicène, germanène et stanene. Ces structures monocouches présentent pareillement un réseau en nid d'abeille ayant une excellente conductivité électrique [87-89]. À la température ambiante, les électrons pourraient traverser les limites de la structure du réseau sans toucher d'autres électrons et atomes, comme c'est le cas dans d'autres matériaux [90-94]. Cette capacité unique permet au stanene de conduire l'électricité sans perdre d'énergie ni dégager de chaleur. Shou-Cheng Zhang a fait ces prédictions en 2013 et il est l'un des auteurs de cette nouvelle étude [95]. Le stanene pourrait être un isolant topologique, dans lequel les charges (les électrons) ne pourraient pas traverser le centre du matériau, mais les électrons pourraient se déplacer librement autour de ses limites et la direction des électrons sera basée sur leur point de rotation, qui peut être vers le haut ou vers le bas. Le point de rotation est une propriété quantique. Le courant électrique ne se dissipe pas car la plupart des impuretés n'affectent pas la rotation et donc elles ne peuvent pas ralentir les électrons selon Zhang et al [96-99]. Dans ce travail, nous étudions un système constitué d'une structure magnétique bicouche mixte de nano-stanene, avec un spin demi-entier $\sigma=\pm 7/2$ et un spin entier $S=\pm 1$ [100, 101]. Les deux couches magnétiques sont séparées par un nombre L de couches non magnétiques. Les interactions de couplage d'échange RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) est établie entre les atomes du plan A et ceux du plan B. Le système est étudié en utilisant les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis.

II.2.2 Présentation du système et de l'hamiltonien

La structure bicouche de type nano-stanene est étudiée dans le cas des conditions aux limites libres. Le système est composé de deux plans de type nano-stanene A et B avec des spins mixtes

$\sigma = \pm 7/2$ et $S = \pm 1$, séparés par un nombre L de couches non magnétiques. Le nombre total de spins du système est $N = N_\sigma + N_S = 64$ avec $N_\sigma = 32$ (16 spins dans chaque plan) et $N_S = 32$ (16 spins dans chaque plan), (voir Fig. II.7).

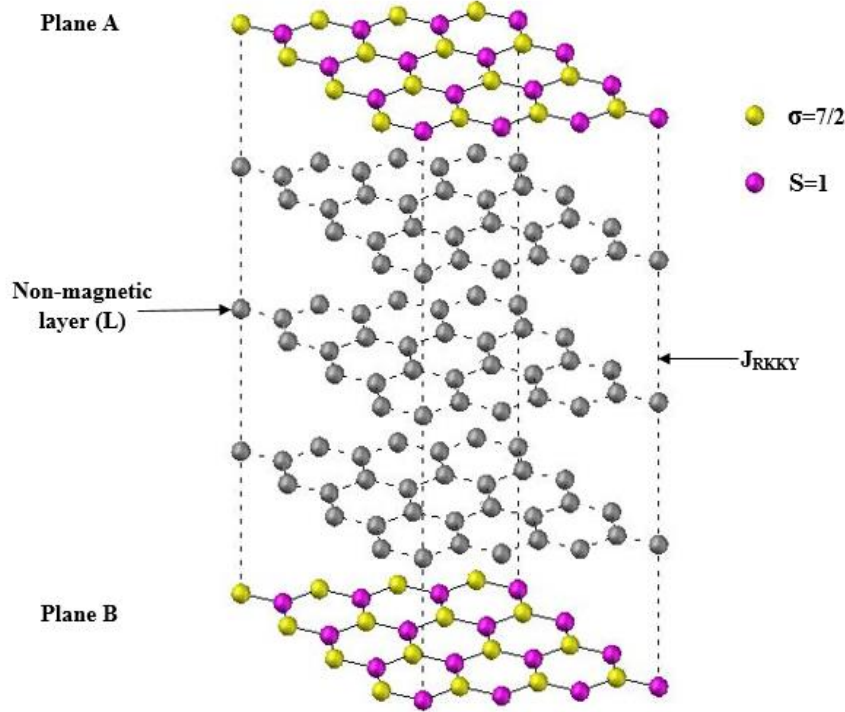


Fig. II.7: Représentation schématique de deux plans magnétiques de type nano-stanene séparés par des couches non magnétiques.

L'hamiltonien de la structure de type nano-stanene est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{\sigma S} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - J_{RKKY}^{\sigma} \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} \sigma_i \sigma_j - J_{RKKY}^S \sum_{\substack{i \in A \\ j \in B}} S_i S_j - H \left(\sum_i \sigma_i + \sum_j S_j \right) - D_{\sigma} \sum_j \sigma_j^2 - D_S \sum_i S_i^2 \quad (\text{II. 4})$$

Où $J_{\sigma S}$ est l'interaction de couplage d'échange entre les spins (σ et S) dans les plans A et B. Le terme J_{RKKY}^{σ} est l'interaction de couplage d'échange entre les spins σ dans le plan A et les spins σ dans le plan B, tandis que J_{RKKY}^S est l'interaction de couplage d'échange entre les spins S dans le plan A et les spins S dans le plan B. H est le champ magnétique externe et D est le champ

cristallin. En effet, les champs cristallins D_σ et D_S agissent respectivement sur les spins S et σ . Dans ce cas, nous limiterons cette étude pour $D = D_\sigma = D_S$. Pour plus de simplification, nous prenons : $J_{RKKY} = J_{RKKY}^\sigma = J_{RKKY}^S$.

Et J_{RKKY} est l'interaction entre les deux couches magnétiques voir (Eq. II.2).

II.2.3 Résultats et discussion

Les résultats sont obtenus par simulation de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. En effet, nous commençons par étudier les diagrammes de phase pour la température nulle (état fondamental) dans la sous-section II.2.3.1, puis, nous explorons dans la sous-section II.2.3.2 le comportement des aimantations et susceptibilités thermiques, l'aimantation totale en fonction du champ cristallin (D) et du champ magnétique extérieur (H), pour les températures non nulles.

II.2.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans la présente sous-section, nous étudions les diagrammes des phases à l'état fondamental de la structure de type nano-stanene bicouche dans le cadre du modèle Blume-Capel avec des spins mixtes $\sigma = \pm 7/2$ (nombre d'états $= 2\sigma + 1 = 8$) et $S = \pm 1$ (nombre d'états $= 2S + 1 = 3$). Ce modèle de Blume-Capel conduit à $8 \times 3 = 24$ configurations possibles.

Nous présentons dans les Figs. II.8.a et II.8.b les diagrammes de phase de l'état fondamental pour $L=1$ et $L=10$, respectivement dans le plan (H , D) pour la valeur du paramètre ferrimagnétique fixe $J_{S\sigma} = -1$. Nous évaluons l'impact des champs cristallin et magnétique externe. De ces figures, nous déduisons que seulement 18 phases sont stables parmi les 24 configurations possibles. Les configurations stables sont: $(+1/2, +1)$; $(+1/2, 0)$; $(+5/2, +1)$; $(+3/2, +1)$; $(+7/2, +1)$; $(+7/2, 0)$; $(+7/2, -1)$; $(+5/2, -1)$; $(+3/2, -1)$; $(-7/2, +1)$; $(-3/2, +1)$; $(-1/2, 0)$; $(-1/2, -1)$; $(-5/2, +1)$; $(-3/2, -1)$; $(-5/2, -1)$; $(-7/2, 0)$; $(-7/2, -1)$. On en déduit une symétrie parfaite par rapport à l'axe $H=0$. Nous remarquons que lorsque le nombre de couches non-magnétiques augmente, l'aire des phases magnétiques augmente pour certaines configurations à savoir : $(+5/2, +1)$; $(+3/2, +1)$; $(+1/2, +1)$; $(+1/2, 0)$; $(-1/2, 0)$; $(-1/2, -1)$; $(-3/2, -1)$ et $(-5/2, -1)$. Alors que l'aire des phases magnétiques diminue pour d'autres configurations notamment : $(+7/2, +1)$; $(+7/2, 0)$; $(+7/2, -1)$; $(+5/2, -1)$; $(+3/2, -1)$; $(-3/2, +1)$; $(-5/2, +1)$; $(-7/2, +1)$; $(-7/2, 0)$ et $(-7/2, -1)$.

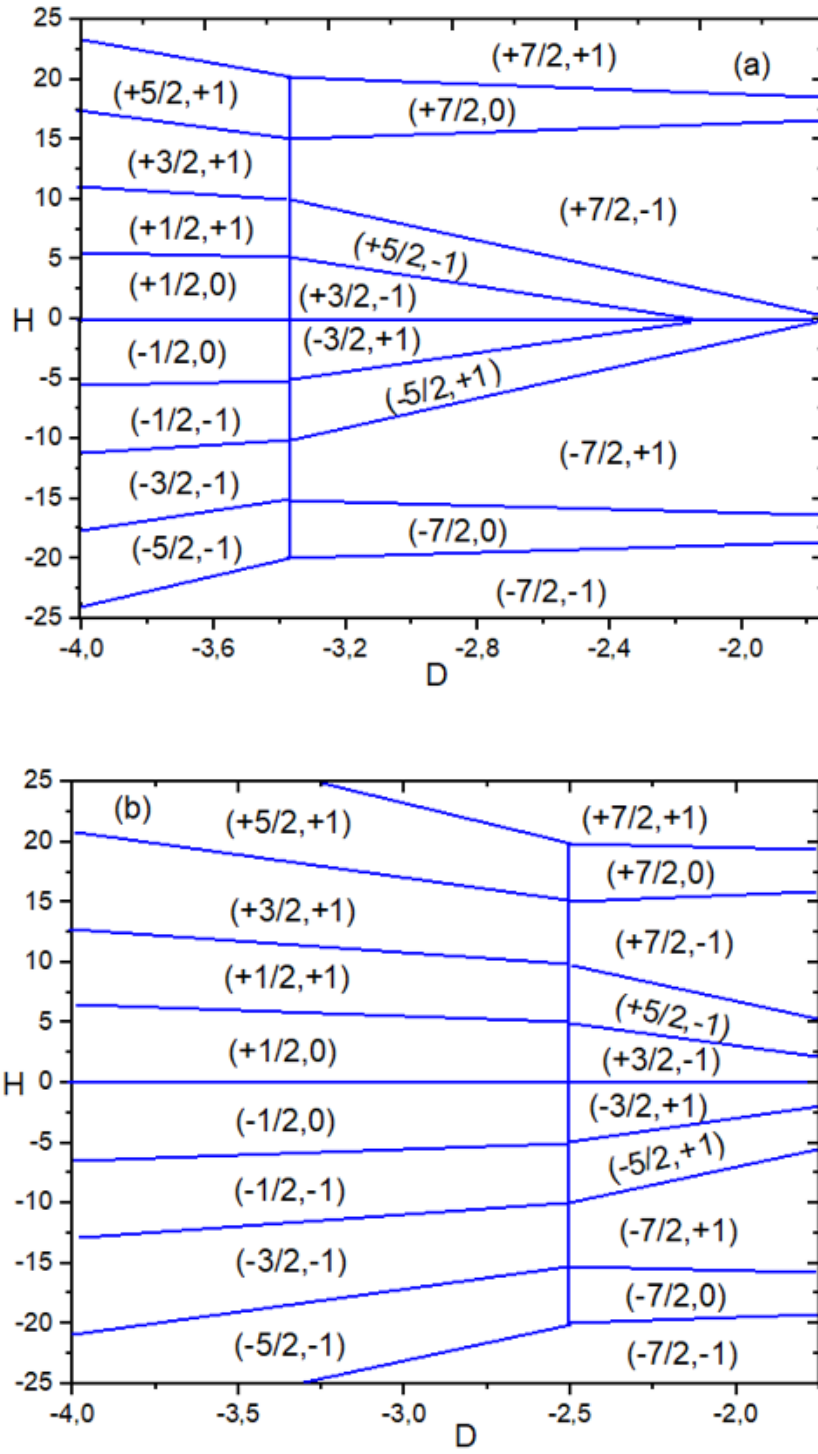
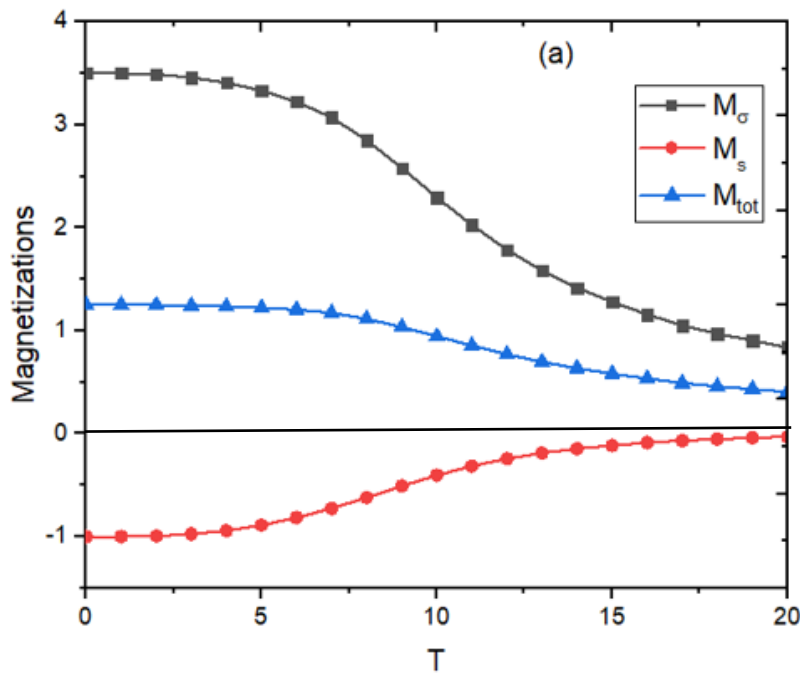


Fig. II.8 : Diagrammes de phase de l'état fondamental pour $J_{So} = -1$: (a) $L=1$ et (b) $L=10$.

II.2.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans cette partie, nous utilisons les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis pour explorer l'effet des interactions J_{RKKY} sur les propriétés magnétiques de la structure de type nano-stanene bicouche. Nous illustrons sur la Fig. II.9.a les aimantations thermiques partielles (M_S et M_σ) et totale (M_{tot}). Cette figure est présentée en absence du champ cristallin et pour les valeurs des paramètres physiques fixes à savoir $H=1.5$, $L=1$ ($J_{\text{RKKY}} = 0,87$) et $J_{S\sigma} = -1$. Les aimantations $M_\sigma = +7/2$ et $M_S = -1$ sont obtenues à très basse température ($T \approx 0$). Les valeurs des aimantations sont en parfait accord avec les spins ($\sigma = \pm 7/2$ et $S = \pm 1$) présentés dans les diagrammes de phase de l'état fondamental Figs. II.8.a et II.8.b.

La Fig. II.9.a montre que les aimantations diminuent pour la valeur de température de blocage et le système tend vers la phase paramagnétique ($M_{\text{tot}} \approx 0$). En outre, nous illustrons sur la Fig. II.9.b les susceptibilités magnétiques thermiques partielles (χ_S et χ_σ) et totale (χ_{tot}) pour les mêmes valeurs des paramètres utilisés sur la Fig. II.9.a. La valeur de la température de blocage est localisée par le maximum de la susceptibilité totale et a pour valeur $T_B \approx 12$.



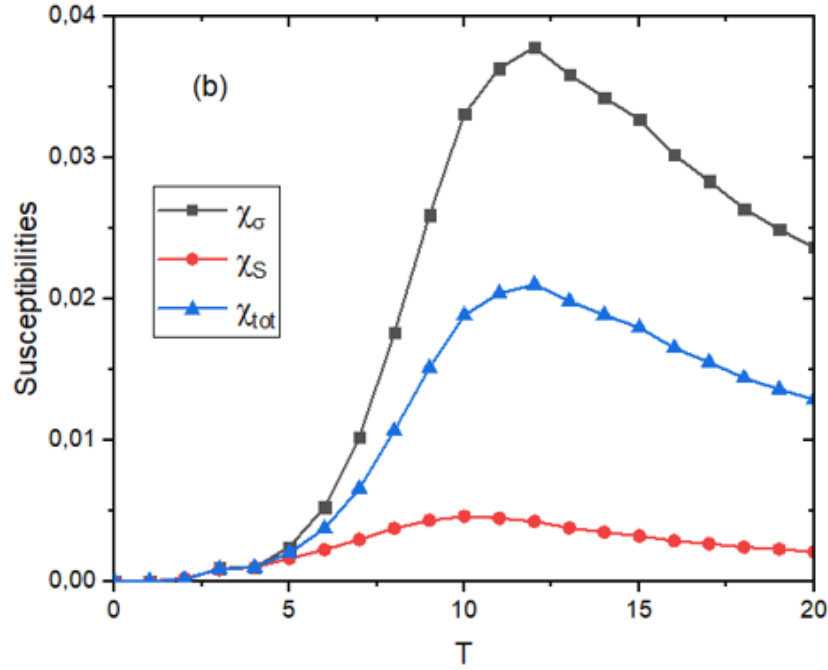


Fig. II.9: Aimantations (a) et susceptibilités (b) en fonction de la température : $D=0$, $H=1.5$, $L=1$ et $J_{S\sigma} = -1$.

Nous présentons sur les Figs. II.10.a et II.10.b le comportement thermique des aimantations et des susceptibilités magnétiques totales, respectivement, pour différentes valeurs des couches non magnétiques : $L=1$ ($J_{RKKY} = 0,87$), $L=2$ ($J_{RKKY} = 0,13$) et $L=10$ ($J_{RKKY} = 2,83 \times 10^{-3}$). Ces figures sont tracées en l'absence du champ cristallin ($D=0$) et pour les valeurs des paramètres fixes $H=1.5$ et $J_{S\sigma} = -1$. La Fig. II.10.a montre que lorsque le nombre de couches non magnétiques augmente, la valeur de la température de blocage (T_B) diminue. Ceci est dû essentiellement au fait que J_{RKKY} diminue quand L augmente facilement ainsi le passage du système de l'état ordonné à l'état désordonné. Un tel comportement de T_B est confirmé par la Fig. II.10.b qui montre le déplacement du pic de susceptibilité totale vers les valeurs de températures faibles. En effet, ce comportement confirme le résultat précédent. En effet, les valeurs de température de blocage obtenues, pour le nombre de couches non magnétiques $L=1$, 2 et 10, sont respectivement $T_B \approx 12$, 10 et 8.

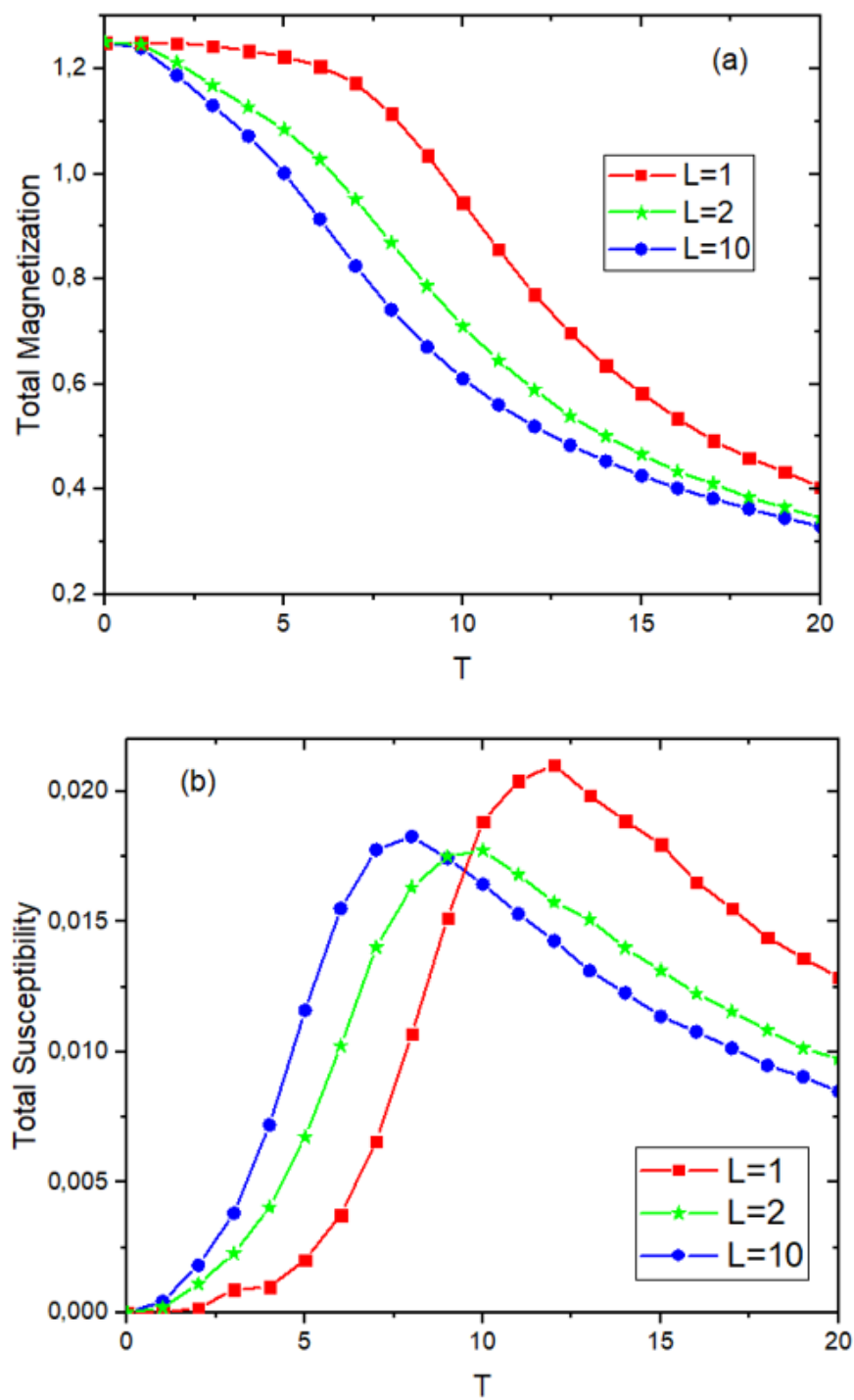
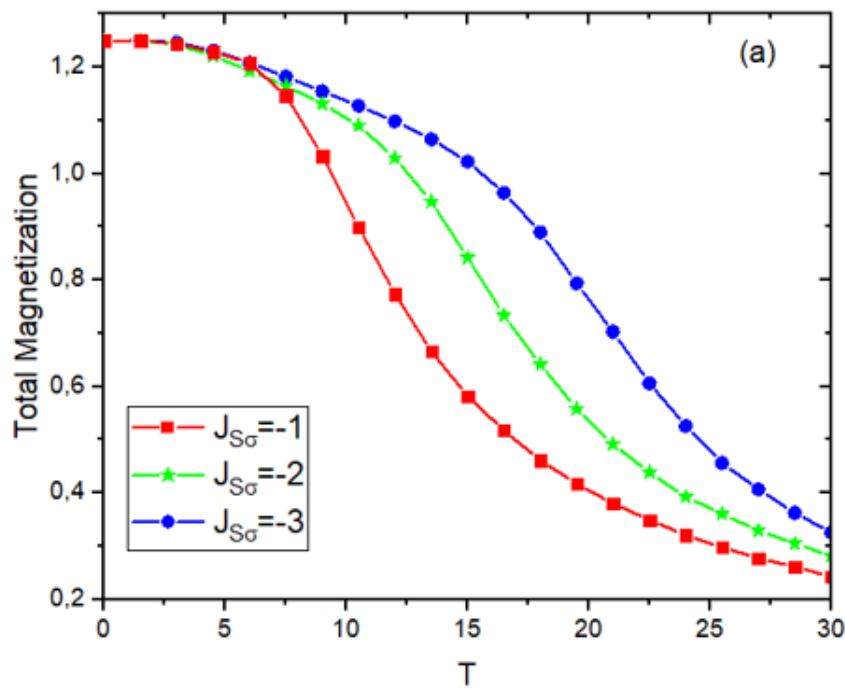


Fig. II.10 : Aimantation totale (a), susceptibilité totale (b) en fonction de la température pour : $D=0$, $H=1.5$ et $J_{S\sigma} = -1$.

Par ailleurs, pour examiner l'effet du paramètre ferrimagnétique $J_{S\sigma}$. Nous illustrons sur les Figs. II.11.a et II.11.b les aimantations et les susceptibilités totales, respectivement. Ces figures sont tracées en l'absence du champ cristallin ($D=0$) et pour les valeurs des paramètres fixes $H=1.5$ et $L=1$. À partir de la Fig. II.11.a, la chute des aimantations totales vers zéro est retardée en augmentant la valeur du paramètre $|J_{S\sigma}|$. Un tel résultat est dû au renforcement de la cohésion entre spins par l'augmentation du paramètre $|J_{S\sigma}|$. De plus, sur la Fig. II.11.b, les valeurs de température de blocage correspondent aux pics de susceptibilité totale. En effet, les températures de blocage obtenues pour le paramètre ferrimagnétique $J_{S\sigma} = -1, -2$ et -3 sont respectivement $T_B \approx 12, 18$ et 22.5 .



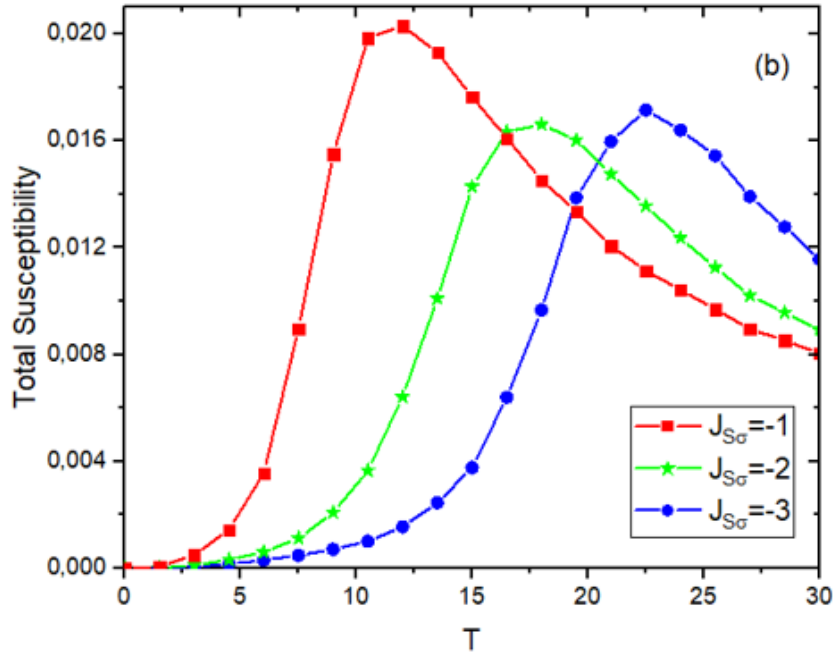


Fig. II.11: Aimantation totale (a), susceptibilité totale (b) en fonction de la température pour : $D=0$, $H=1.5$ et $L=1$.

Pour étudier le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin D pour un nombre sélectionné de couches non magnétiques ($L = 1, 2$ et 10) et pour les valeurs des paramètres fixes de la température $T=2$, de l'interaction de couplage $J_{S\sigma} = -1$ et du champ magnétique externe $H=1.5$, nous présentons les résultats obtenus sur la Fig. II.12.a. À partir de cette figure, nous constatons que les aimantations totales du système subissent une transition du second ordre pour $D_T \approx -2$ pour toutes les valeurs du paramètre L . Ensuite, pour $D_T \geq 0$, les aimantations totales saturent indépendamment de la valeur du paramètre L en convergeant vers l'aimantation de saturation totale $M_{\text{sat}} \approx 1.25$. Par ailleurs, nous illustrons sur la Fig. II.12.b l'aimantation totale en fonction du champ cristallin D , pour plusieurs valeurs du paramètre ferrimagnétique ($J_{\sigma s} = -1, -2$ et -3) et pour les valeurs des paramètres fixes de température $T=2$, pour une seule couche non magnétique et pour un champ magnétique externe $H = 1.5$. Cette figure montre que lorsque $D_T \approx -3$, les aimantations totales du système subissent une transition du second ordre pour toutes les valeurs d'interaction de couplage d'échange $J_{\sigma s}$. Ensuite, pour $D_T \geq 0$, les aimantations totales convergent indépendamment des valeurs du paramètre $J_{\sigma s}$, vers l'aimantation de saturation $M_{\text{sat}} \approx 1.25$.

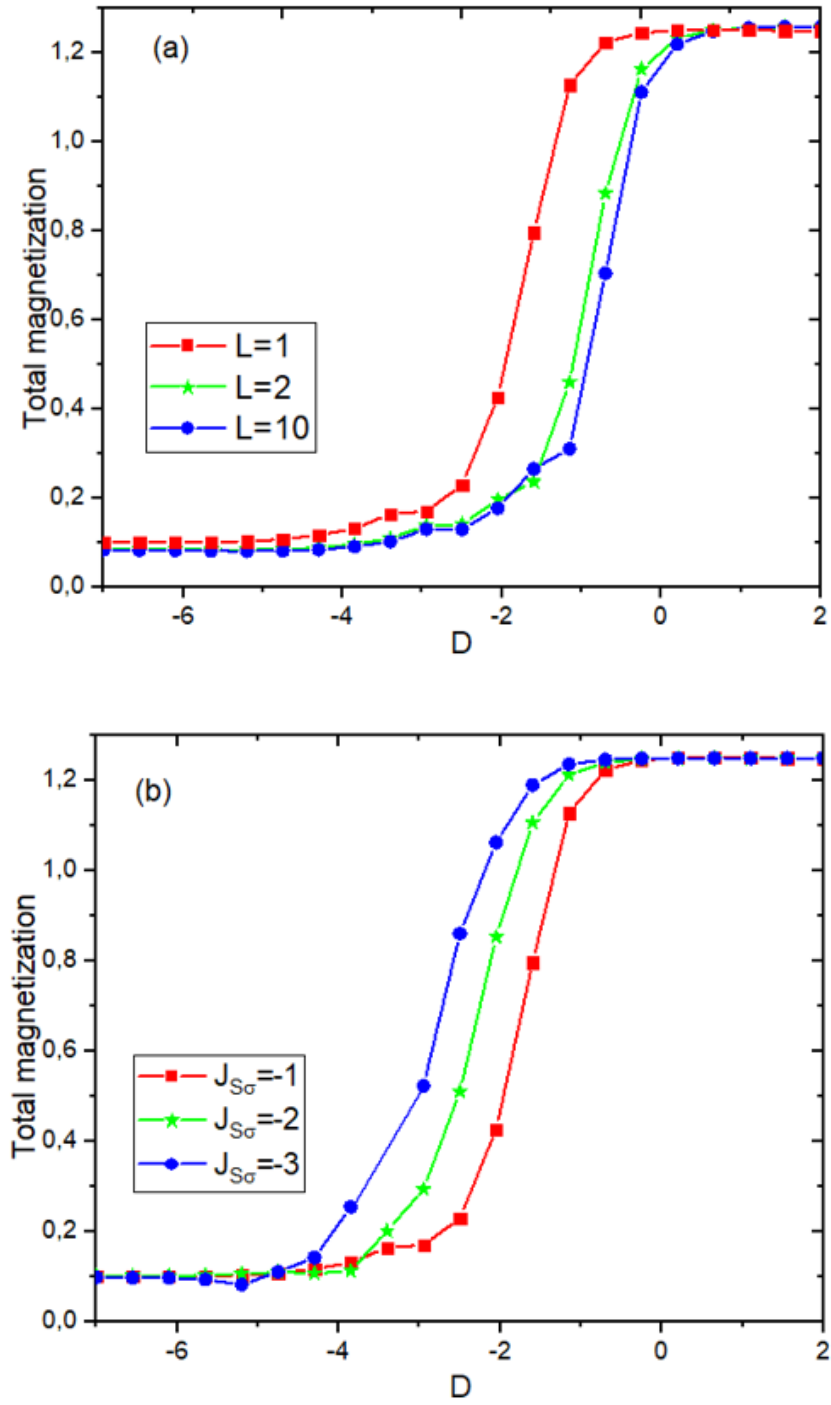
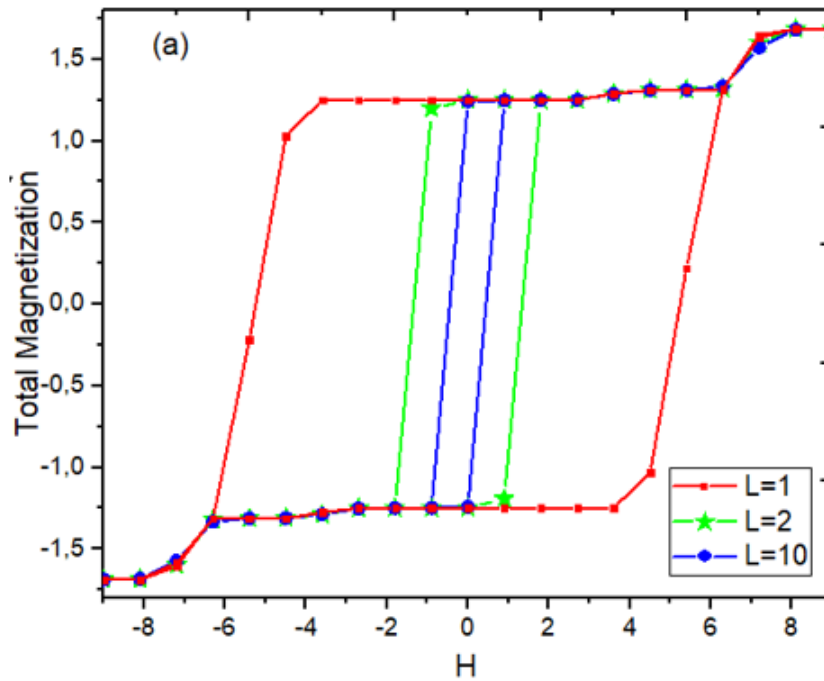


Fig. II.12 : Aimantation totale en fonction du champ cristallin pour une température fixe $T=2$
: (a) $J_{S\sigma} = -1$ et $H=1.5$, (b) $L=1$ et $H=1.5$.

Finalement, les Figs. II.13.a et II.13.b montrent les cycles d'hystérésis magnétiques d'une structure de type nano-stanene bicouche, en l'absence du champ cristallin ($D=0$). En effet, la Fig. II.13.a est illustrée pour différentes valeurs de couches non magnétiques ($L=1, 2$ et 10) et pour le paramètre ferrimagnétique fixe $J_{S\sigma}=-1$ et de température $T=0.5$. À partir de cette figure, les surfaces des boucles et le champ coercitif diminuent en augmentant le nombre de couches non magnétiques. En effet, ce résultat est confirmé par la Fig. II.10.a où l'aimantation totale diminue en augmentant le nombre de couches non magnétiques de $L=1$ à 10 . Enfin, pour compléter cette étude, nous présentons sur la Fig. II.13.b l'effet de la température sur les cycles d'hystérésis, pour les valeurs des paramètres fixes : $J_{S\sigma}=-1$ et $L=1$. Cette figure montre que les surfaces des boucles et le champ coercitif diminuent en augmentant la température.



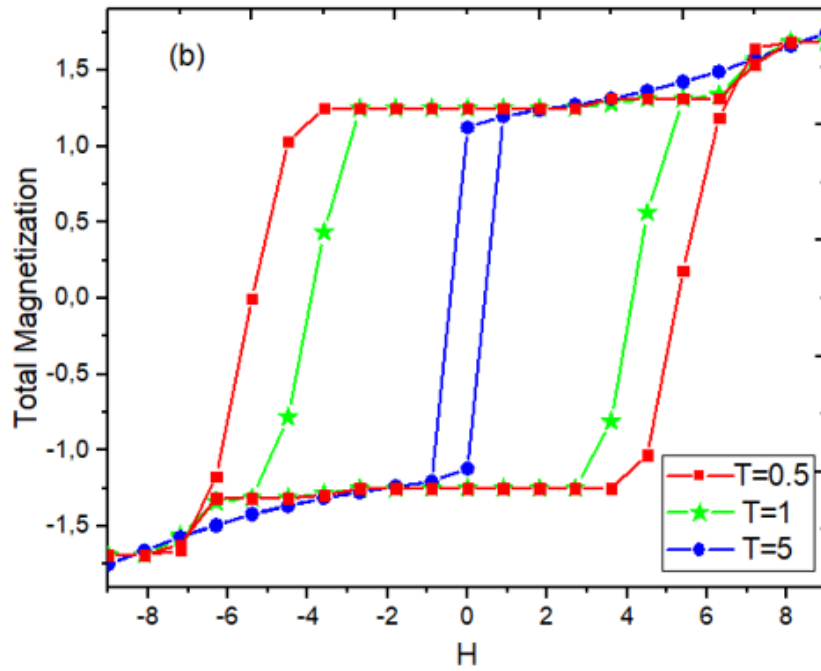


Fig. II.13 : Cycles d'hystérésis magnétique en l'absence de champ cristallin pour : (a) $J_{S\sigma}=-1$ et $T=0.5$, (b) $J_{S\sigma} = -1$ et $L=1$.

II.3 Propriétés magnétiques d'une nanostructure de type naphthalène en présence de l'interaction RKKY : Simulations de Monte Carlo

II.3.1 Introduction

De nombreuses études scientifiques ont été basées sur des molécules composées d'atomes de carbone et d'hydrogène appelées : hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) [102-104]. Grâce aux (HAP), d'importantes applications en nanotechnologie ont été réalisées [105-107]. De plus, plusieurs études expérimentales ont été menées sur des molécules de type (HAP) telles que la structure ovalène, notamment la distinction des molécules précurseurs de suie gazeuses et des particules précurseurs de suie par spectrométrie de masse à photoionisation [108] et les effets du solvant sur la pureté de l'ovalène [109]. De plus, l'une des structures intéressantes de (HAP) est la structure naphthalène de formule $C_{10}H_8$. Le ferromagnétisme à température ambiante de cette structure est déjà étudié [110]. Dans le présent travail, nous nous intéressons à un système constitué d'une nanostructure magnétique de type naphthalène bicouche, avec des spins mixtes $\sigma=\pm 7/2$ et $S=\pm 1$, séparés par un nombre L de couches non magnétiques. Les interactions de couplage d'échange RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) sont pris en

compte entre les atomes de spin du plan A et ceux du plan B. Le système est étudié à l'aide des simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis.

II.3.2 Présentation du système et de l'hamiltonien

La nanostructure de type naphthalène est étudiée sous les conditions aux limites libres. Le système est composé par deux plans de type naphthalène A et B avec des spins mixtes $\sigma = \pm 7/2$ et $S = \pm 1$, séparés par des couches non magnétiques. Le nombre total d'atomes du système étudié est $N = N_\sigma + N_S = 36$ avec $N_\sigma=16$ (8 atomes dans chaque plan) et $N_S=20$ (10 atomes dans chaque plan), (voir Fig. II.14).

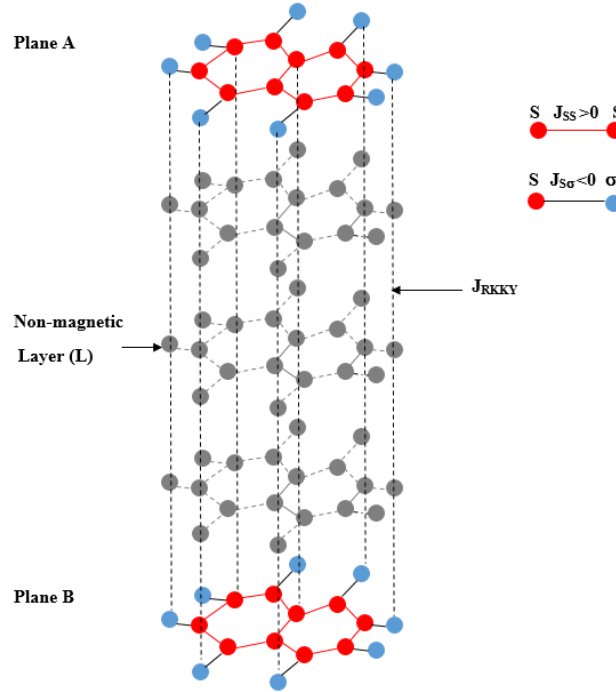


Fig. II.14: Représentation schématique de deux plans magnétiques de type naphthalène séparés par des couches non magnétiques.

L'hamiltonien de la nanostructure de type naphthalène est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{SS} \sum_{\langle i \in A, j \in A \rangle} S_i S_j - J_{S\sigma} \sum_{\langle i \in B, j \in B \rangle} S_K \sigma_l - J_{RKKY} \left(\sum_{\langle m, n \rangle} S_m S_n + \sum_{\langle m, n \rangle} \sigma_p \sigma_q \right) - H \left(\sum_i S_i + \sum_j \sigma_j \right) - D_S \sum_{j \in B} S_j^2 - D_\sigma \sum_{j \in B} \sigma_j^2 \quad (\text{II. 5})$$

où J_{SS} et $J_{S\sigma}$ représentent l'interaction de couplage d'échange entre les deux premiers atomes voisins. Les notations $\langle i, j \rangle$, $\langle k, l \rangle$, $\langle m, n \rangle$ et $\langle p, q \rangle$ représentent les premiers proches voisins. J_{RKKY} représente l'interaction entre les plans magnétiques de type naphthalène A et B. H est le champ magnétique externe. Les champs cristallins D_S et D_σ agissent respectivement sur les spins S et σ . Dans tout ce travail, nous prendrons les champs cristallins identiques agissant respectivement sur les spins S et σ : $D=D_S=D_\sigma$.

II.3.3 Résultats et discussion

Dans cette section, les résultats sont obtenus par simulation Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. En effet, nous étudions les diagrammes de phase à l'état fondamental dans la sous-section II.3.3.1. Par ailleurs, nous explorons dans la sous-section II.3.3.2 pour les températures non nulles, le comportement des aimantations et susceptibilités thermiques ainsi que l'aimantation totale en fonction du champ cristallin (D) et du champ magnétique externe (H).

II.3.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans cette partie, nous présentons les diagrammes de phase à l'état fondamental de la nanostructure de type naphthalène bicouche dans le cadre d'un modèle Blume-Capel, avec des spins mixtes $S = \pm 1$ et $\sigma = \pm 7/2$. En effet, nous avons utilisé l'hamiltonien de l'équation (2.20) pour simuler l'énergie des $3 \times 8 = 24$ configurations possibles. En fait, $S = \pm 1$ génère un nombre d'états $2S+1=3$ et $\sigma = \pm 7/2$ génère un nombre d'états $2\sigma+1=8$. Pour chacune des configurations possibles, nous calculons l'énergie correspondante. La configuration la plus stable est celle ayant l'énergie minimale. Ainsi, nous balayons tout l'espace des phases en fixant les différents paramètres physiques notamment : les couplages d'échange, le champ magnétique externe et le champ cristallin. Les diagrammes de phase de l'état fondamental sont rapportés dans le cas correspondant à $L=1$.

Dans la Fig. II.15.a, nous étudions les effets des champs magnétiques et cristallin externes. Cette figure est présentée dans le plan (H , D) pour la valeur fixe des interactions de couplage d'échange $J_{SS} = 1$ et $J_{S\sigma} = -1$. Dans ce plan, il y a une parfaite symétrie des configurations par rapport à l'axe $H=0$. On constate que seules neuf configurations sont stables pour des valeurs H positives, à savoir : $(+7/2, +1)$; $(+7/2, -1)$; $(+5/2, +1)$; $(+5/2, -1)$; $(+3/2, +1)$; $(-3/2, +1)$; $(+1/2, +1)$; $(-1/2, +1)$ et $(+1/2, 0)$. En revanche, neuf configurations stables sont obtenues pour

les valeurs négatives de H , à savoir : $(-7/2, -1)$; $(-7/2, +1)$; $(-5/2, -1)$; $(-5/2, +1)$; $(-3/2, -1)$; $(+3/2, -1)$; $(-1/2, -1)$; $(+1/2, -1)$ et $(-1/2, 0)$.

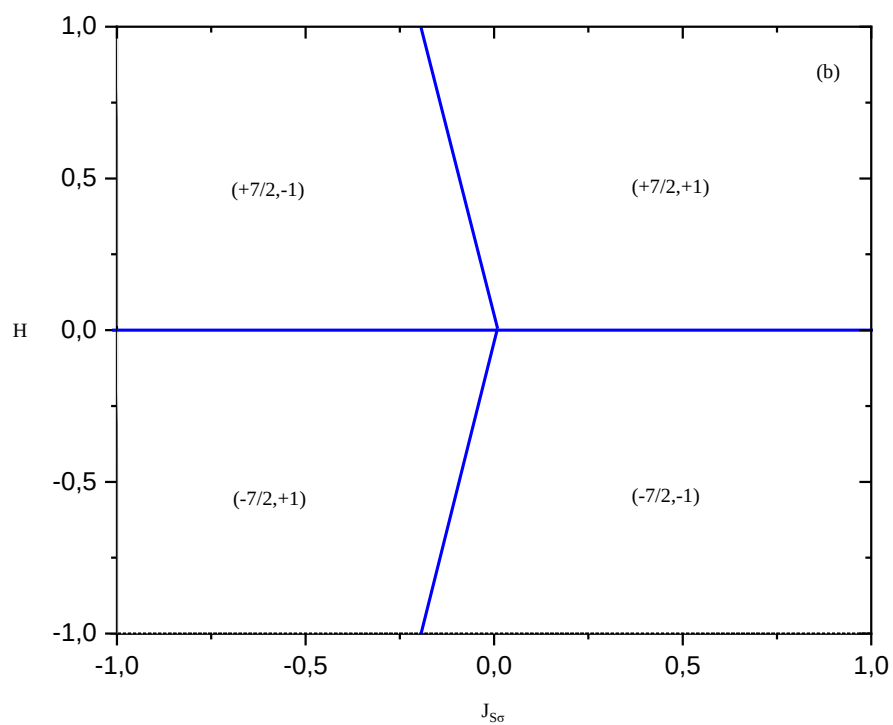
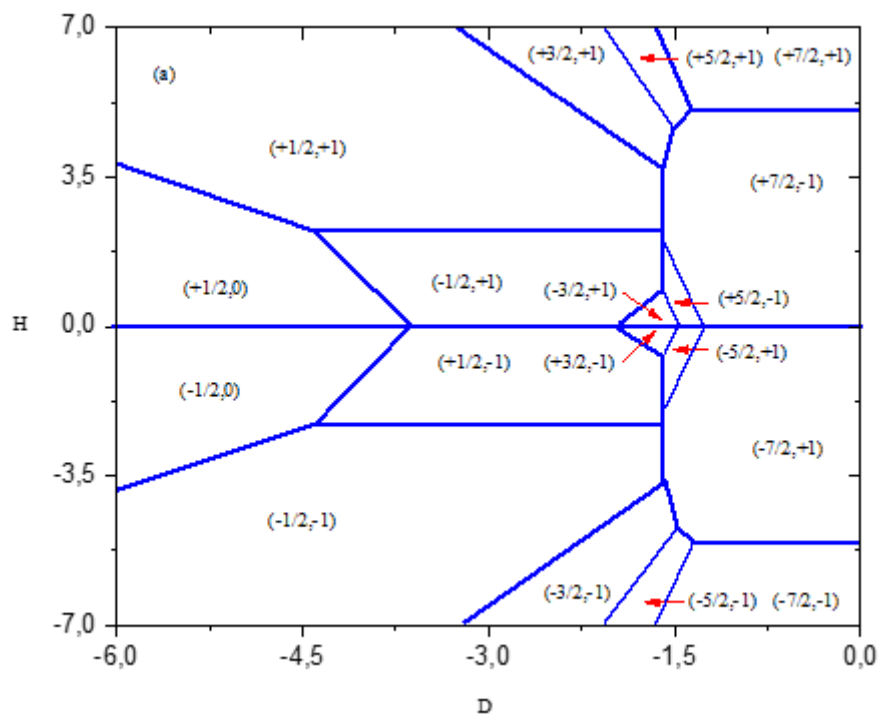
La Fig. II.15.b est tracée dans le plan $(H, J_{S\sigma})$. Dans cette figure, nous explorons les effets du champ magnétique externe et du paramètre ferrimagnétique en l'absence de champ cristallin ($D=0$) et pour l'interaction de couplage d'échange fixe $J_{SS} = 1$. On observe seulement quatre phases qui correspondent aux valeurs maximales des spins S et σ sont stables : $(+7/2, +1)$; $(+7/2, -1)$; $(-7/2, -1)$ et $(-7/2, +1)$.

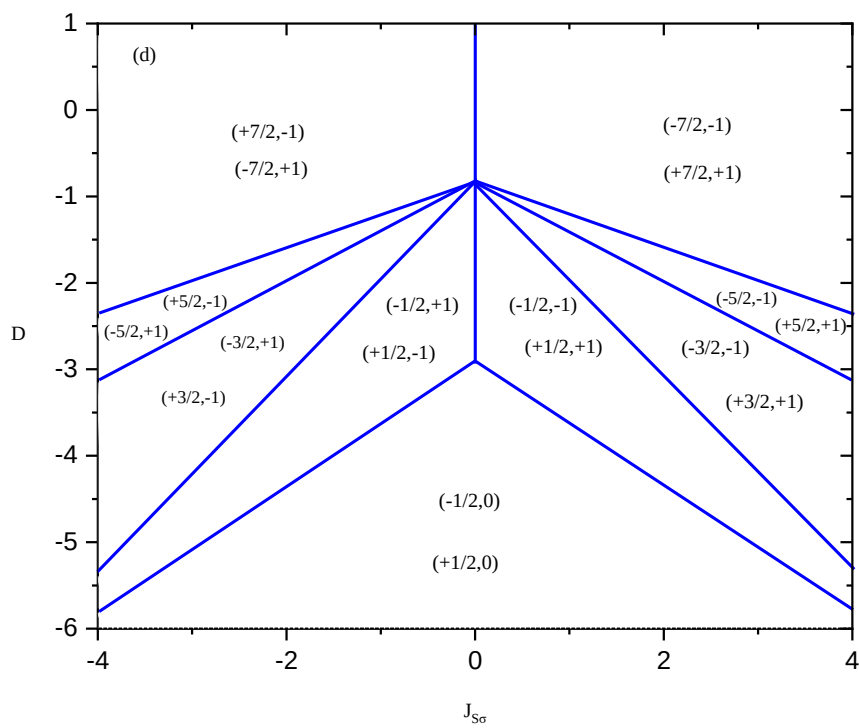
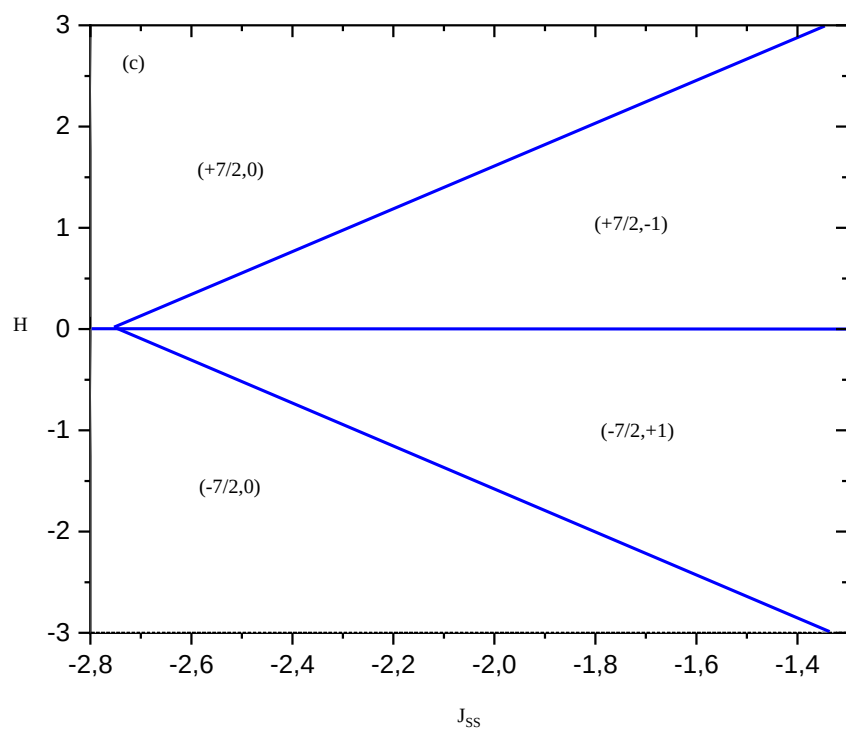
La Fig. II.15.c illustre le diagramme de phase dans le plan (H, J_{SS}) pour les valeurs des paramètres fixes : $D = 0$ et $J_{S\sigma} = -1$. Une symétrie parfaite est encore présente sur cette figure pour $H = 0$. On constate que seules quatre phases sont stables, à savoir : $(+7/2, 0)$ et $(+7/2, -1)$ pour $H > 0$, $(-7/2, 0)$ et $(-7/2, +1)$ pour $H < 0$.

Pour explorer l'effet du paramètre ferrimagnétique $J_{S\sigma}$ et du champ cristallin D sur les configurations stables, nous traçons la Fig. II.15.d dans le plan $(D, J_{S\sigma})$. Cette figure est illustrée en l'absence de champ magnétique externe ($H=0$) et pour une valeur fixe d'interaction de couplage d'échange $J_{SS}=1$. Cette figure présente dix-huit phases stables. Toutes les configurations stables trouvées sur cette figure sont les mêmes que celles déjà trouvées sur la Fig. II.15.a.

La Fig. II.15.e est présentée dans le plan (D, J_{SS}) , en l'absence du champ magnétique externe, pour une valeur fixe du paramètre ferrimagnétique $J_{S\sigma}=-1$. Cette figure montre seulement dix configurations stables, à savoir : $(+7/2, 0)$; $(-7/2, 0)$; $(+1/2, 0)$; $(-1/2, 0)$; $(+7/2, -1)$; $(-7/2, +1)$; $(+5/2, +1)$; $(-5/2, +1)$; $(+3/2, -1)$ et $(-3/2, +1)$.

Enfin, la Fig. II.15.f est tracée dans le plan $(J_{S\sigma}, J_{SS})$, en l'absence des champs magnétique externe et cristallin. Cette figure ne présente que six configurations stables, à savoir : $(-7/2, 0)$; $(+7/2, 0)$; $(-7/2, -1)$; $(+7/2, +1)$; $(-7/2, +1)$ et $(+7/2, -1)$.





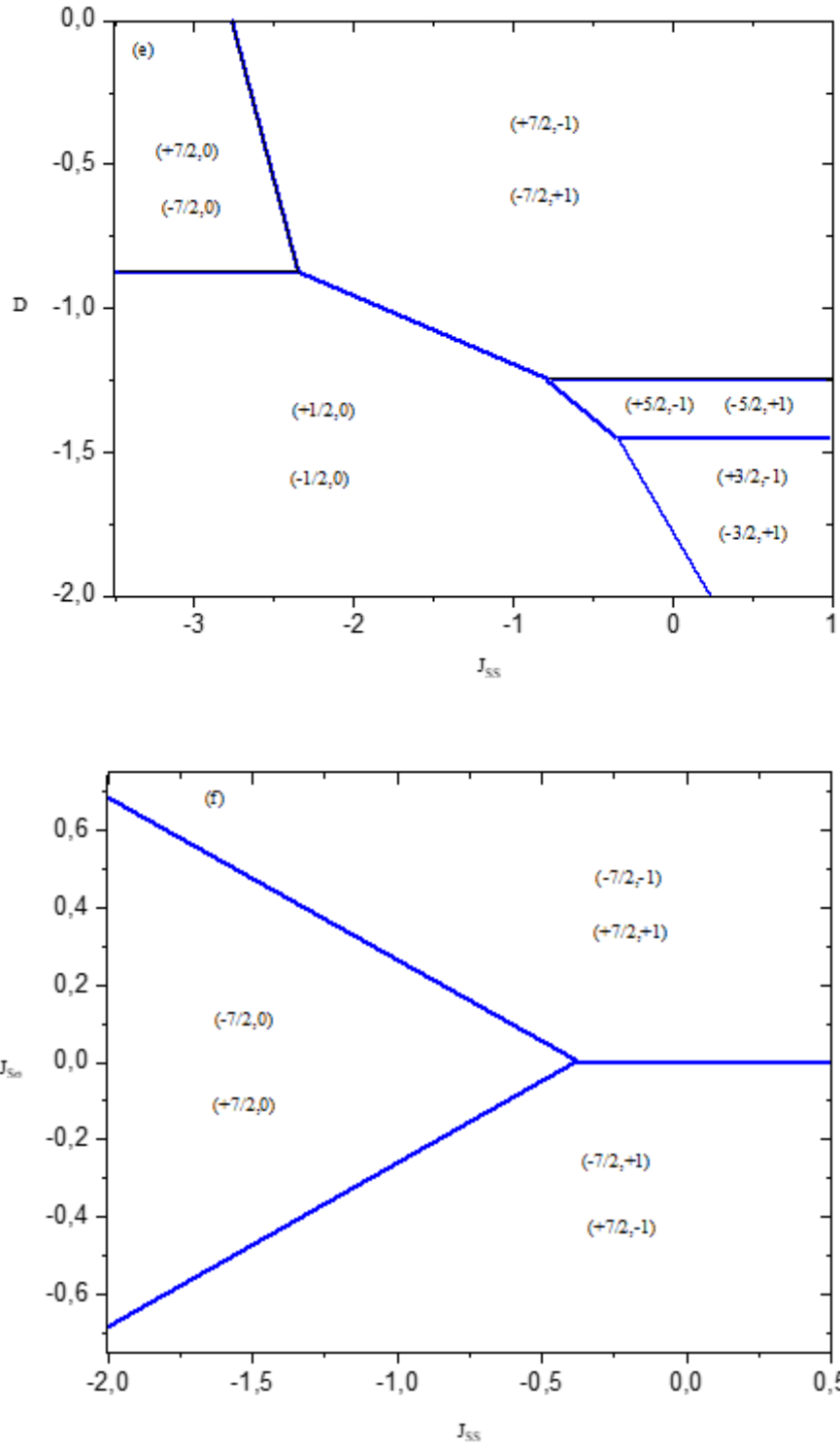
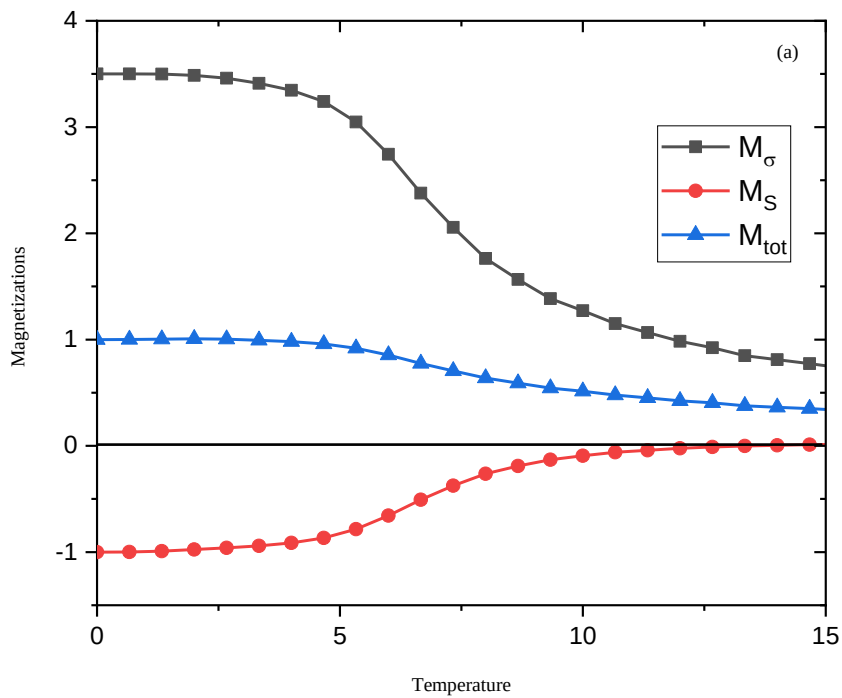


Fig. II.15 : Diagrammes de phase à l'état fondamental pour $L=1$: (a) $J_{SS}=1$ et $J_{S\sigma}=-1$, (b) $J_{SS}=1$ et $D=0$, (c) $J_{S\sigma}=-1$ et $D=0$, (d) $J_{SS}=1$ et $H=0$, (e) $J_{S\sigma}=-1$ et $H=0$, (f) $H=0$ et $D=0$.

II.3.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans cette sous-section, nous nous basons sur les simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis pour étudier l'effet des interactions J_{RKKY} sur les propriétés magnétiques de la nanostructure de type naphthalène en bicouches. Dans la Fig. II.16.a, nous présentons le comportement thermique des aimantations partielles et totales. Une telle figure est tracée en l'absence du champ cristallin et pour des paramètres physiques fixes $H=1$, $L=1$, $J_{\text{SS}} = 1$ et $J_{\text{S}\sigma} = -1.5$. Pour les très basses températures ($T \approx 0$), les aimantations $M_{\sigma} = +7/2$ et $M_{\text{S}} = -1$ donnent $M_{\text{tot}} = \frac{16 \times M_{\text{S}} + 20 \times M_{\sigma}}{36} = 1$. De telles valeurs de spin sont en accord avec les configurations présentées sur les Figs II.16. Les aimantations diminuent en augmentant la température (T) pour tendre vers la phase paramagnétique ($M_{\text{tot}} \approx 0$) pour $T > T_{\text{B}}$ (T_{B} est la température de blocage). De plus, nous illustrons sur la Fig. II.16.b les susceptibilités magnétiques thermiques partielles et totales pour les mêmes valeurs des paramètres fixés sur la Fig. II.16.a. La valeur de la température de blocage T_{B} , correspondant au point d'inflexion des courbes sur la figure II.16a, est déterminée par le maximum du pic de la susceptibilité et est égale à $T_{\text{B}} \approx 7.34$.



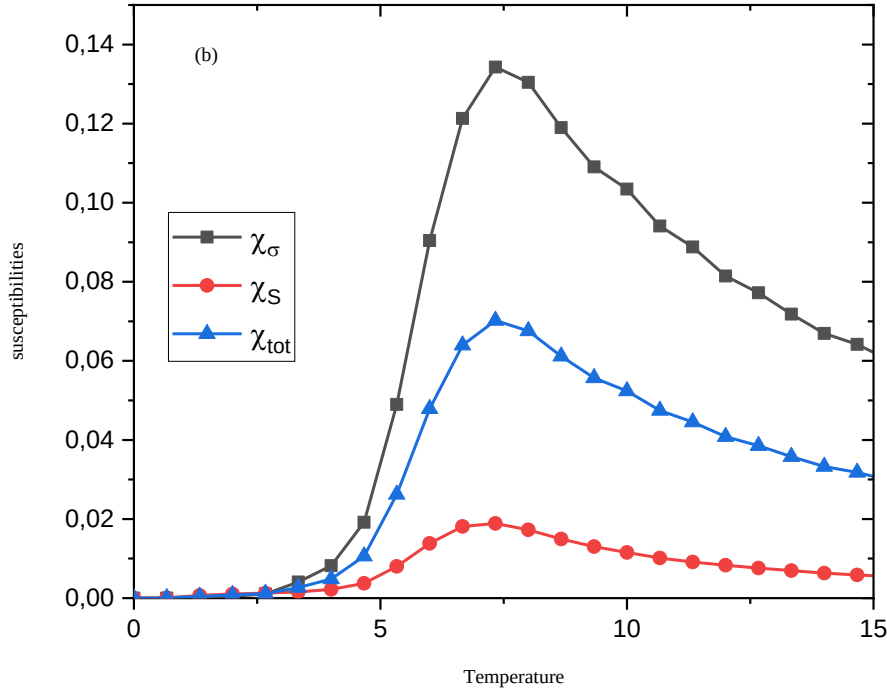
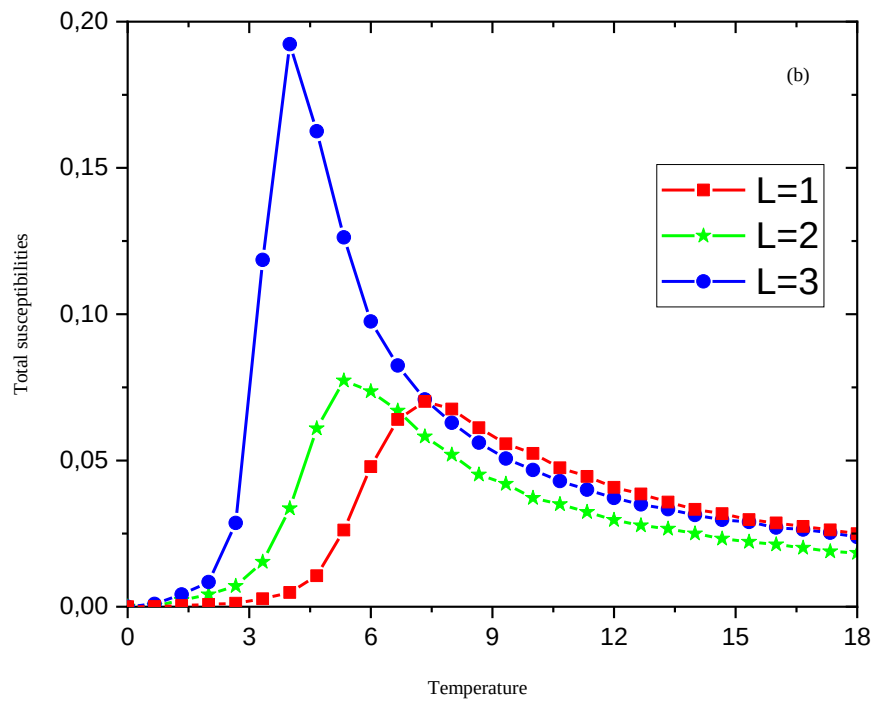
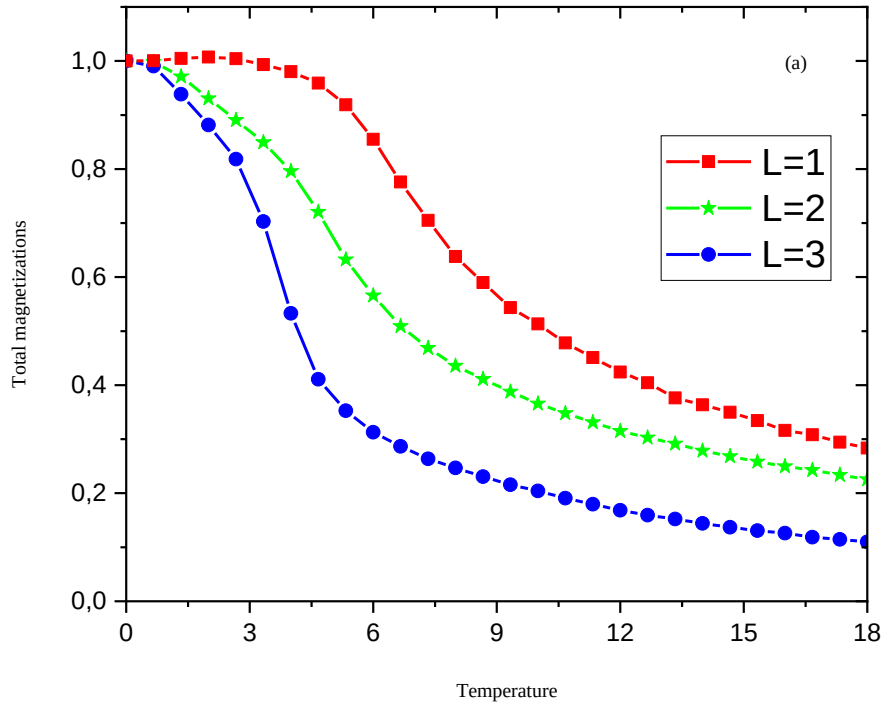


Fig. II.16 : Aimantations (a) et Susceptibilités (b) en fonction de la température pour des paramètres fixes : $D=0$, $H=1$, $L=1$, $J_{ss}=1$ et $J_{s\sigma}=-1.5$.

Maintenant, nous présentons sur la Fig. II.17.a, le comportement des aimantations totales en fonction de la température pour plusieurs valeurs de couches non magnétiques ($L = 1, 2$ et 3). Une telle figure est tracée pour les valeurs des paramètres fixes : $D = 0$, $H = 1$, $J_{ss} = 1$ et $J_{s\sigma} = -1.5$. À partir de cette figure, on constate que la valeur de la température de blocage diminue lorsque l'on augmente le nombre de couches non magnétiques. Pour déterminer précisément les valeurs des températures de blocage, nous avons tracé sur la Fig. II.17.b les susceptibilités totales pour les mêmes valeurs prises pour la Fig. II.17.a. Le déplacement des pics des susceptibilités totales vers les basses températures, par augmentation du nombre de couches non magnétiques, confirme le comportement des aimantations totales. Les valeurs de températures de blocage obtenues, pour les cas de couches non magnétiques $L=1, 2$ et 3 , sont $T_B \approx 7.34, 5.34$ et 4 , respectivement. Pour illustrer clairement les effets des couches non magnétiques sur la température de blocage, nous présentons sur la Fig. II.17.c les résultats obtenus pour les mêmes paramètres physiques que ceux utilisés pour les Fig. II.17.a et II.17.b.

Nous constatons que la température de blocage décroît pour $L \leq 3$ et n'est pas affectée par l'augmentation du nombre de couches non magnétiques pour $L > 3$.



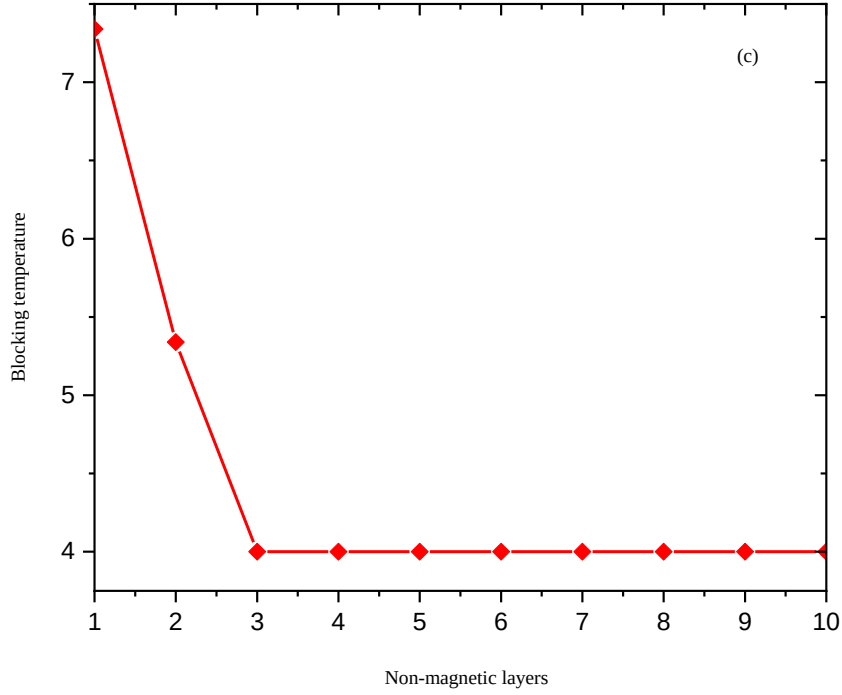


Fig. II.17 : Aimantations totales (a), susceptibilités totales (b) en fonction de la température et (c) température de blocage en fonction des couches non magnétiques. Ces figures sont tracées pour des paramètres fixes : $D=0$, $H=1$, $J_{SS}=1$ et $J_{S\sigma} = -1.5$.

Sur les Fig. II.18.a et II.18.b, nous examinons l'effet du couplage d'échange ferrimagnétique $J_{S\sigma}$, entre les spins S et σ , sur le comportement thermique des aimantations et des susceptibilités totales. Ces figures sont tracées en l'absence de champ cristallin et pour les valeurs fixes des paramètres : $H=1$, $L=1$ et $J_{SS}=1$. Nous remarquons que l'effet de l'augmentation du paramètre $|J_{S\sigma}|$ est d'accroître la température de blocage. À partir de la Fig. II.18.b, les valeurs de la température de blocage sont $T_B \approx 7, 9$ et 11.5 pour les valeurs du paramètre ferrimagnétique $|J_{S\sigma}| = 1, 3$ et 5 , respectivement.

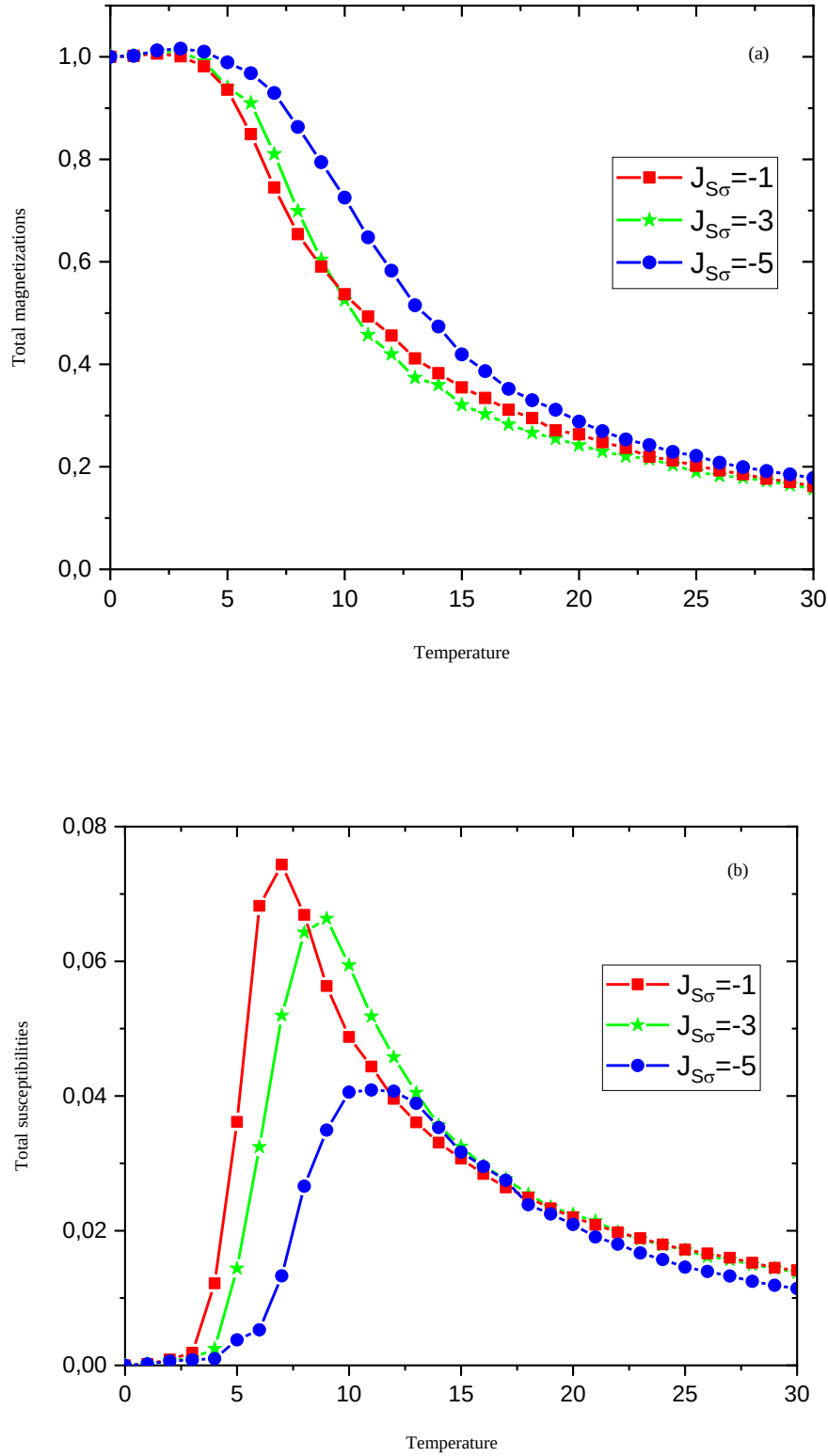


Fig. II.18 : Aimantations totales (a) et susceptibilités totales (b) en fonction de la température pour des paramètres fixes : $D=0$, $H=1$, $L=1$ et $J_{SS}=1$.

Pour étudier le comportement des aimantations totales en fonction du champ cristallin, la Fig. II.19.a est présentée pour des valeurs fixes du nombre de couches non magnétiques ($L=1, 2$ et 3) et pour le paramètre $J_{S\sigma} = -1$. Alors que la Fig. II.19.b est rapportée pour des valeurs fixes du paramètre ferrimagnétique $J_{S\sigma} = -1, -3$ et -5 et pour $L = 1$. Ces deux Figs. II.19.a et II.19.b sont obtenus pour les paramètres : $T=1$, $H=1$ et $J_{SS}=1$. D'après la Fig. II.19.a, le système présente trois régions : (i) $D < -4$, (ii) $-4 < D < 0$ et (iii) $D > 0$. Concernant la région (i), les aimantations totales sont constantes. Alors que pour la région (ii) les aimantations totales subissent une transition du premier ordre puis restent constantes. Enfin, lors de l'augmentation des valeurs de D , région (iii), les aimantations totales gardent une valeur constante après une transition du premier ordre entre les régions (ii) et (iii). Dans la région (iii), l'aimantation totale atteint la saturation ($M_{\text{sat}} = 1$) indépendamment du paramètre L . Par ailleurs, la Fig. II.19.a montre l'existence d'une valeur du champ cristallin D_{comp1} , entre les régions (i) et (ii), pour laquelle l'aimantation totale est nulle : $D_{\text{comp1}} = -4.27$ pour $L=1$, $D_{\text{comp1}} = -3.6$ pour $L=2$ et 3 . De même, entre les régions (ii) et (iii), apparaît D_{comp2} qui prend les valeurs suivantes : $D_{\text{comp2}} = -1.21$ pour $L=1$, $D_{\text{comp2}} = -0.54$ pour $L=2$ et $D_{\text{comp2}} = -0.20$ pour $L=3$. Les points de compensation concernant le champ cristallin (D_{comp1} et D_{comp2}) correspondent aux transitions entre phases ordonnées. En effet, D_{comp1} concerne une transition du premier ordre des aimantations totale positives vers des valeurs négatives. Tandis que D_{comp2} représente une transition du premier ordre de l'aimantation totale négative vers une valeur positive.

Nous présentons cette fois sur la Fig. II.19.b les effets du paramètre ferrimagnétique $J_{S\sigma}$ en fonction du champ cristallin. A partir de cette figure, nous constatons que dans la région des valeurs du champ cristallin $D < -5.5$, les aimantations totales ne sont pas affectées par la variation des valeurs $J_{S\sigma}$. Cette figure montre une même topologie que la Fig. II.19.a. La seule différence est que pour la région $-4 < D < -1.7$, nous avons deux transitions de second ordre (pour $J_{S\sigma}=-1$ et -3) et une transition du premier ordre (pour $J_{S\sigma} = -5$). Nous notons que le système converge vers la même valeur de saturation de l'aimantation totale $M_{\text{sat}}=1$.

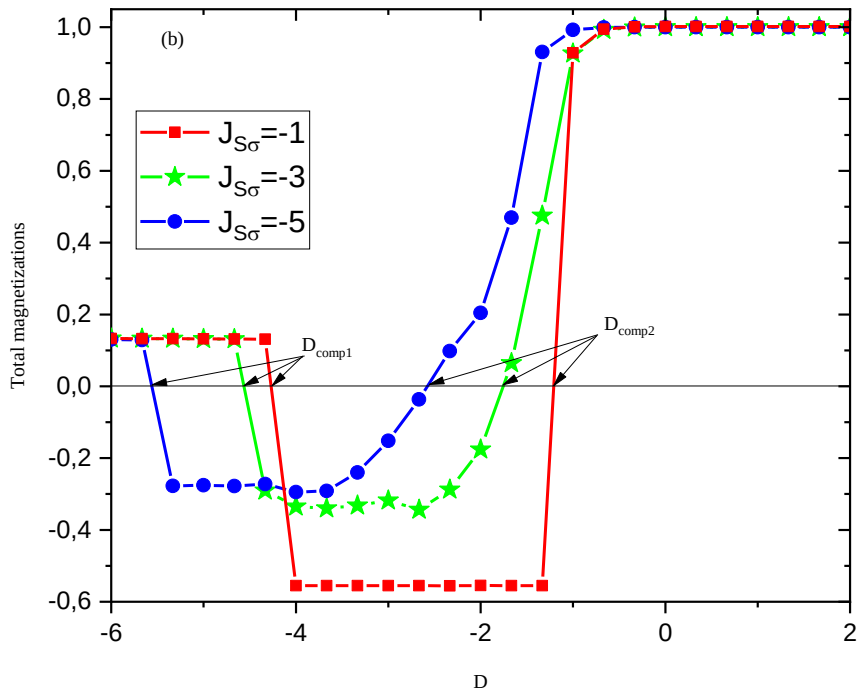
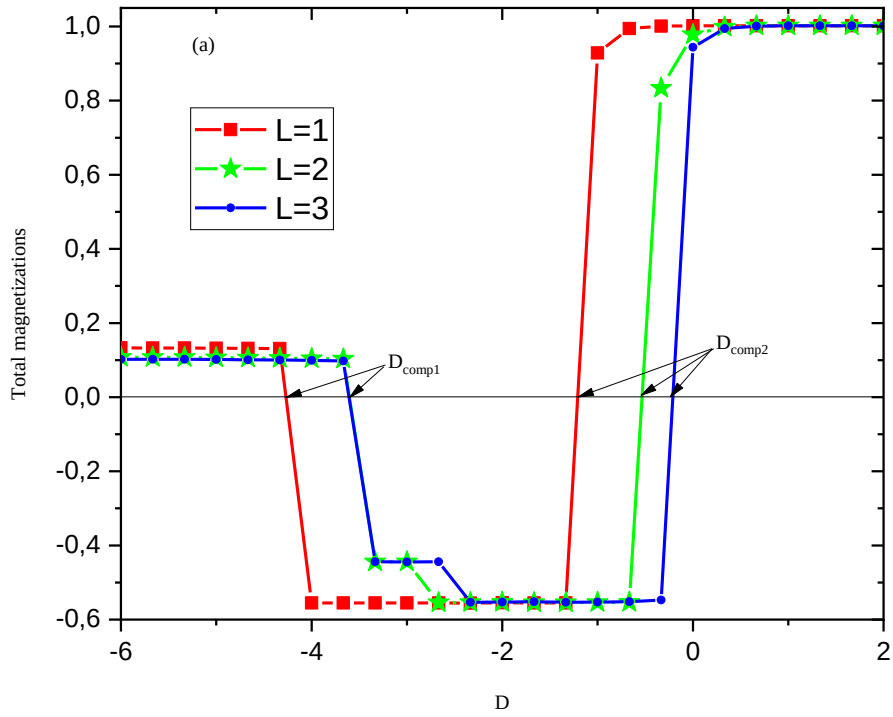
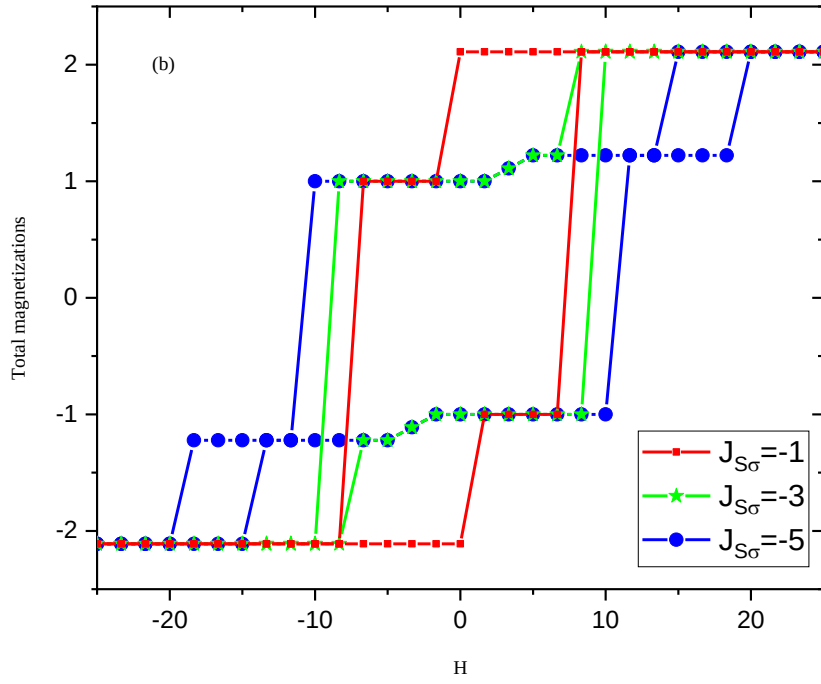
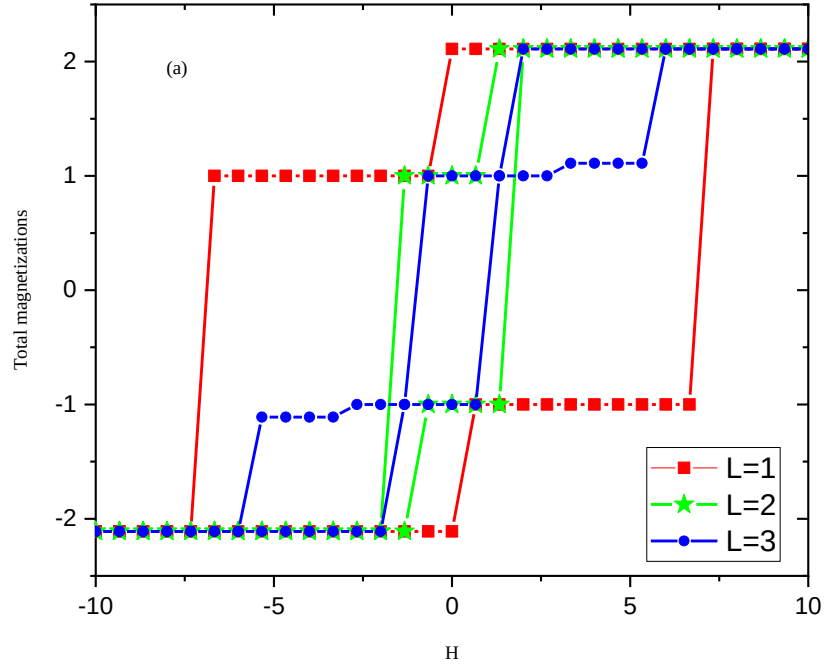


Fig. II.19 : Aimantations totales en fonction du champ cristallin pour : $T = 1$, $H = 1$ et $J_{SS} = 1$
: (a) $J_{S\sigma} = -1$, (b) $L = 1$.

Pour terminer cette étude, nous présentons sur les Figs. II.20 (a-d) les cycles d'hystérésis magnétiques de la nanostructure de type naphthalène. Ces cycles donnent le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ magnétique externe, tout en mettant en évidence le champ coercitif, l'aimantation de saturation et l'aimantation rémanente. De tels paramètres nous informent sur l'état du système (ferrimagnétique ou anti-ferrimagnétique).

La Fig. II.20.a est tracée pour plusieurs valeurs de couches non magnétiques $L=1, 2$ et 3 , en l'absence de champ cristallin ($D=0$) et pour des paramètres fixes : $J_{S\sigma} = -1$, $J_{SS}=1$ et $T=0.01$. Cette figure montre que l'augmentation des couches non magnétiques diminue le champ coercitif magnétique conduisant à une diminution des surfaces des boucles et donne l'apparition de trois boucles pour la valeur $L=3$. Par contre, la Fig. II.20.b est tracée pour les valeurs sélectionnées du paramètre ferrimagnétique $J_{S\sigma} = -1, -3$ et -5 et pour les paramètres fixes : $D=0$, $J_{SS}=1$, $L=1$ et $T=0.01$. Sur cette figure, l'augmentation de la valeur du paramètre $|J_{S\sigma}|$ augmente le champ coercitif et fait apparaître trois boucles pour la valeur $|J_{S\sigma}|=5$. En outre, la Fig. II.20.c est obtenue pour différentes valeurs du champ cristallin, à savoir $D = 0, -1$ et -3 et pour des paramètres fixes : $J_{S\sigma} = -1$, $J_{SS} = 1$, $L = 1$ et $T = 0.01$. À partir de cette figure, on constate que l'augmentation du champ cristallin $|D|$, en valeur absolue, diminue la surface des boucles et donne naissance à sept boucles pour la valeur $|D| = 3$. Enfin, nous étudions sur la Fig. II.20.d, l'effet de la température sur les cycles d'hystérésis. En effet, nous avons considéré différentes valeurs de température à savoir : $T = 0.01, 0.5$ et 2 et pour les paramètres fixes : $D = 0$, $J_{S\sigma} = -1$, $J_{SS} = 1$ et $L = 1$. L'augmentation de la température diminue le champ coercitif et les surfaces des boucles.



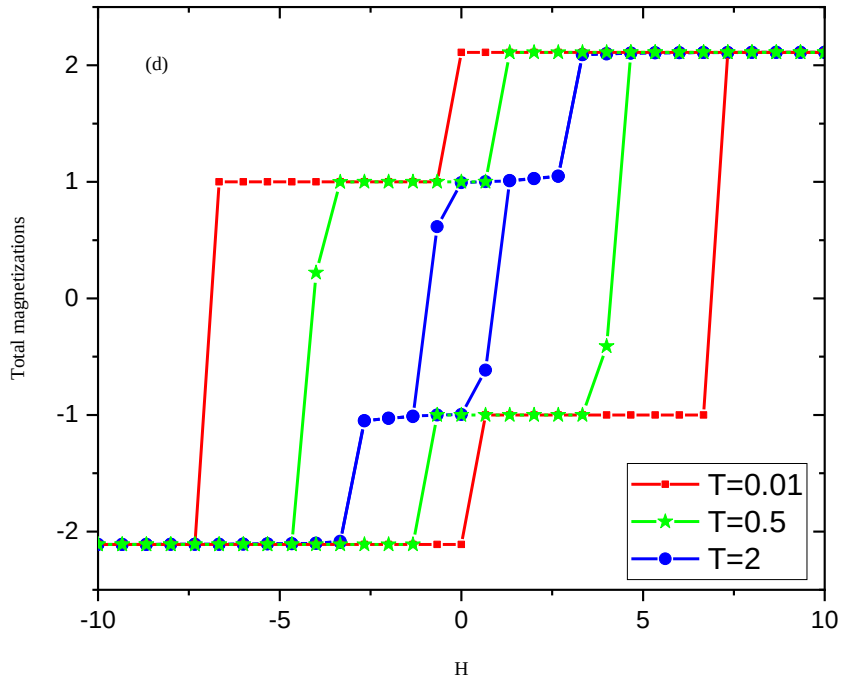
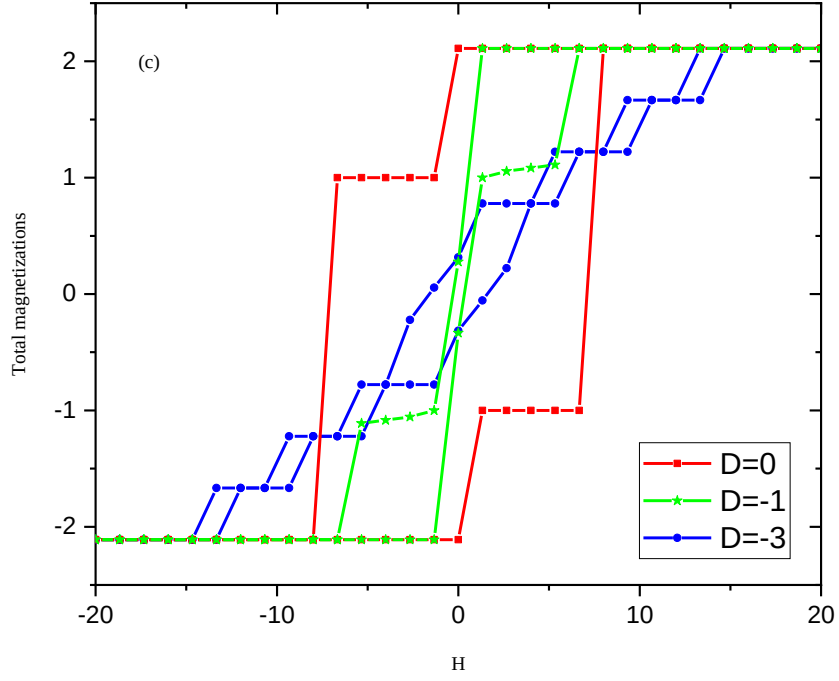


Fig. II.20 : Cycles d'hystérésis de nano-structure de type naphthalène pour: (a) $D=0$, $J_{S\sigma}=-1$, $J_{SS}=1$ et $T=0.01$, (b) $D=0$, $J_{SS}=1$, $L=1$ et $T=0.01$, (c) $J_{S\sigma}=-1$, $J_{SS}=1$, $L=1$ et $T=0.01$, (d) $D=0$, $J_{S\sigma}=-1$, $J_{SS}=1$ et $L=1$.

II.4 Conclusion

En résumé, nous avons étudié numériquement les propriétés magnétiques des systèmes graphyne, stanene et naphtalène constitué de deux couches à spins mixte séparées par un nombre L de couches non-magnétiques. L'interaction RKKY entre les deux couches magnétiques a été prise en compte. Les diagrammes de phase à l'état fondamental pour différents paramètres ont été établis. En outre, les systèmes ont été étudiés numériquement à l'aide des simulations de Monte Carlo. Nous remarquons que la température de transition entre les phases ferrimagnétique et paramagnétique diminue avec l'augmentation du nombre de couches non-magnétiques (L). Enfin, les cycles d'hystérésis magnétiques sont étudiés pour des valeurs fixes des paramètres physiques (L , J_{ss} , D et T). Une diminution des surfaces des boucles et du champ coercitif a été observée en augmentant le nombre de couches non magnétiques et les valeurs de température.

**CHAPITRE III : Température de compensation dans les
structures graphène, borophene ovalène et naphthalène :
Simulations de Monte Carlo**

III. 1 : Effets de dilution sur la température de compensation dans la structure nano-graphène à trois plans : Simulations Monte Carlo

III.1.1 Introduction

Les structures des nanomatériaux ont des applications dans de nombreux domaines, en particulier la spintronique [111]. Récemment, l'étude des structures de graphène a attiré une attention considérable [112,113]. Le graphène est un réseau bidimensionnel de matériaux cristallins constitué d'atomes de carbone contenus dans une structure en nid d'abeille. Monocouche, bicouche et multicouche, des échantillons d'une telle structure ont été étudiés [114–116]. En outre, le nano-graphène présente de nombreuses performances, comme l'énergie électrique, le stockage, la haute stabilité mécanique et la faible intensité. En effet, les anneaux à six membres de benzène de la structure de graphène lui permettent de devenir l'un des matériaux bidimensionnels les plus légers et les plus minces. De nouvelles avancées scientifiques ont élargi la portée du graphène, comme les cellules solaires [117], la magnétorésistance linéaire [118], le génie chimique [119], les sciences de l'environnement [120], etc. Par ailleurs, la présence d'impuretés ou des vacances dans les structures de nano-graphène affecte en grande partie les propriétés physiques et le système d'étude, à savoir sa conductivité thermique [121]. Récemment, plusieurs chercheurs se sont intéressés à étudier les propriétés physiques du graphène multicouches et de ses applications dans différents domaines (voir la référence [122] et les références qui y figurent). De plus, le ferromagnétisme dans le graphène est considéré dans la Réf. [123]. Récemment, l'effet de bord en zigzag sur les propriétés magnétiques du graphène est étudié [124]. De nombreux comportements magnétiques théoriques fonctionnent sur le type graphène, les matériaux ont été réalisés par différentes méthodes. En effet, plusieurs études ont été réalisées sur les propriétés ferromagnétiques des nano-systèmes, en utilisant différentes méthodes telles que l'approximation du champ moyen (MFA) [125] et la théorie du champ efficace (EFT) [126, 127]. Les Simulations Monte Carlo ont également été utilisées pour calculer les propriétés magnétiques d'un réseau nano-graphène [128–135] et de deux couches de nano-graphène à plans non équivalents [136, 137]. D'un autre côté, la présence d'une température de compensation est possible dans ces magnétiques systèmes lorsque l'aimantation totale est nulle [138–146]. En plus, étudier l'effet de la dilution sur les propriétés magnétiques est très important, parce que les systèmes purs sont rares dans la nature [147, 148].

Dans le présent travail, nous considérons une structure de graphène à trois couches avec des plans non équivalents ayant deux types d'atomes (A et B). Chaque couche est composée d'un

seul type d'atome. Les systèmes étudiés sont composés par les structures de la forme ABA et BAB. Nous considérons également la présence de la dilution dans le plan B. Les calculs sont effectués à l'aide de simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis.

III.1.2 Présentation du nano-système et de l'hamiltonien correspondant

Dans cette partie, nous étudions les propriétés magnétiques d'une structure de graphène composée de trois plans non équivalents. Chaque couche est composée exclusivement d'atomes de spin $S=\pm 1$ (plan de type A) ou de spin $\sigma=\pm 3/2$ (plan de type B) : Dans le plan A, il y a N_A atomes et dans le plan B, il y a N_B atomes avec $N_A = N_B = 50$. Le plan B est dilué de manière aléatoire avec des atomes non magnétiques (voir Fig. III.1). En effet, la dilution consiste à substituer aléatoirement un atome magnétique par un autre non magnétique.

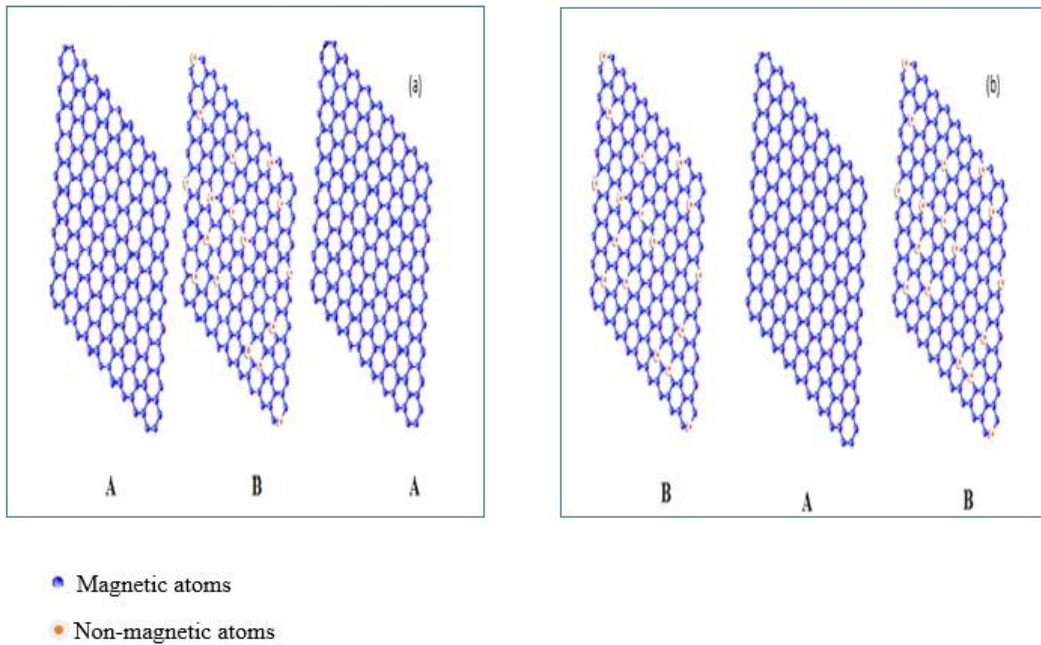


Fig. III.1 : Présentation schématique des systèmes à trois plans avec (a) ABA et (b) BAB. Le plan B est dilué de manière aléatoire avec des atomes non-magnétiques.

L'Hamiltonien du système considéré est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{AA} \sum_{\langle i \in A, j \in A \rangle} S_i S_j - J_{BB} \sum_{\langle i \in B, j \in B \rangle} \varepsilon_i \sigma_i \varepsilon_j \sigma_j - J_{AB} \sum_{\langle i \in A, j \in B \rangle} S_i \varepsilon_j \sigma_j$$

$$- H \left(\sum_{\langle i \in A \rangle} S_i + \sum_{\langle j \in B \rangle} \varepsilon_j \sigma_j \right) - \Delta \sum_{\langle j \in B \rangle} (\varepsilon_j \sigma_j)^2 \quad (\text{III. 1})$$

où J_{AA} , J_{BB} et J_{AB} sont les constantes de couplage d'échange magnétique entre les premiers atomes voisins avec les spins $S-S$, $\sigma-\sigma$ et $S-\sigma$, respectivement. H est le champ magnétique externe et le champ cristallin Δ est appliqué sur tous les spins σ . Le coefficient ε_i est une variable aléatoire désactivée, non corrélée, qui prend la valeur 1 avec la probabilité p pour l'atome magnétique ou 0 avec probabilité $1-p$ pour l'atome non-magnétique. Pour simplifier les notations, nous considérons les paramètres réduits comme suit :

$$R_{AB}=J_{AB}/J_{AA}, R_{BB}=J_{BB}/J_{AA}, h=H/J_{AA}, d=\Delta/J_{AA} \text{ et } t=T/J_{AA}.$$

Dans le cas du système ABA, les aimantations partielles d'atomes de type A sont m_1 et m_3 où $m_1 = m_3$, et d'atomes de type B est m_2 , et l'aimantation totale est m_{ABA} . Alors que pour le système BAB, les aimantations partielles d'atomes de type A est m'_2 et d'atomes de type B sont m'_1 et m'_3 où $m'_1 = m'_3$, et l'aimantation totale est m_{BAB} .

III.1.3 Résultats et discussion

Nous rappelons que les résultats sont obtenus par simulation de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. En effet, nous commençons par étudier les diagrammes de phase à l'état fondamental (température $T=0$) dans la sous-section III.1.3.1. Tandis que nous explorons les deux systèmes ABA et BAB, dans la sous-section III.1.3.2, pour les températures non nulles. En effet, à $T > 0$ le comportement des aimantations en fonction de la température réduite (t) et en fonction du champ cristallin réduit (d) est établi dans le cas pur et dilué.

III.1.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans la première partie de ce chapitre, nous calculons les diagrammes de phase à l'état fondamental à température nulle ($t=0$) en fonction des paramètres de l'hamiltonien du système (III.1). En fait, à partir de cet hamiltonien, nous calculons les énergies pour différentes configurations. Dans le cas du système ABA, nous avons $3 \times 4 \times 3 = 36$ configurations. Alors que dans le cas du système BAB, le nombre de configurations est $4 \times 3 \times 4 = 48$. Nous rappelons que la « phase stable » correspond à la valeur énergétique minimale parmi ces différentes configurations. Pour le système ABA, nous commençons par la Fig. III.2.a, tracée dans le plan (d, h), avec les valeurs fixes des interactions de couplage d'échange réduites : $R_{BB} = 3$ et $R_{AB} = -1$. Parmi les 36 phases possibles, seulement 12 se sont avérées stables. Cependant, dans le cas du système BAB, nous traçons la Fig. III.2.b dans le plan (d, h), les phases stables qui correspondent aux valeurs fixes des interactions de couplage d'échange réduit : $R_{BB} = 2$ et $R_{AB} = -0.8$. Dans cette figure, seulement 18 sont stables parmi les 48 phases possibles.

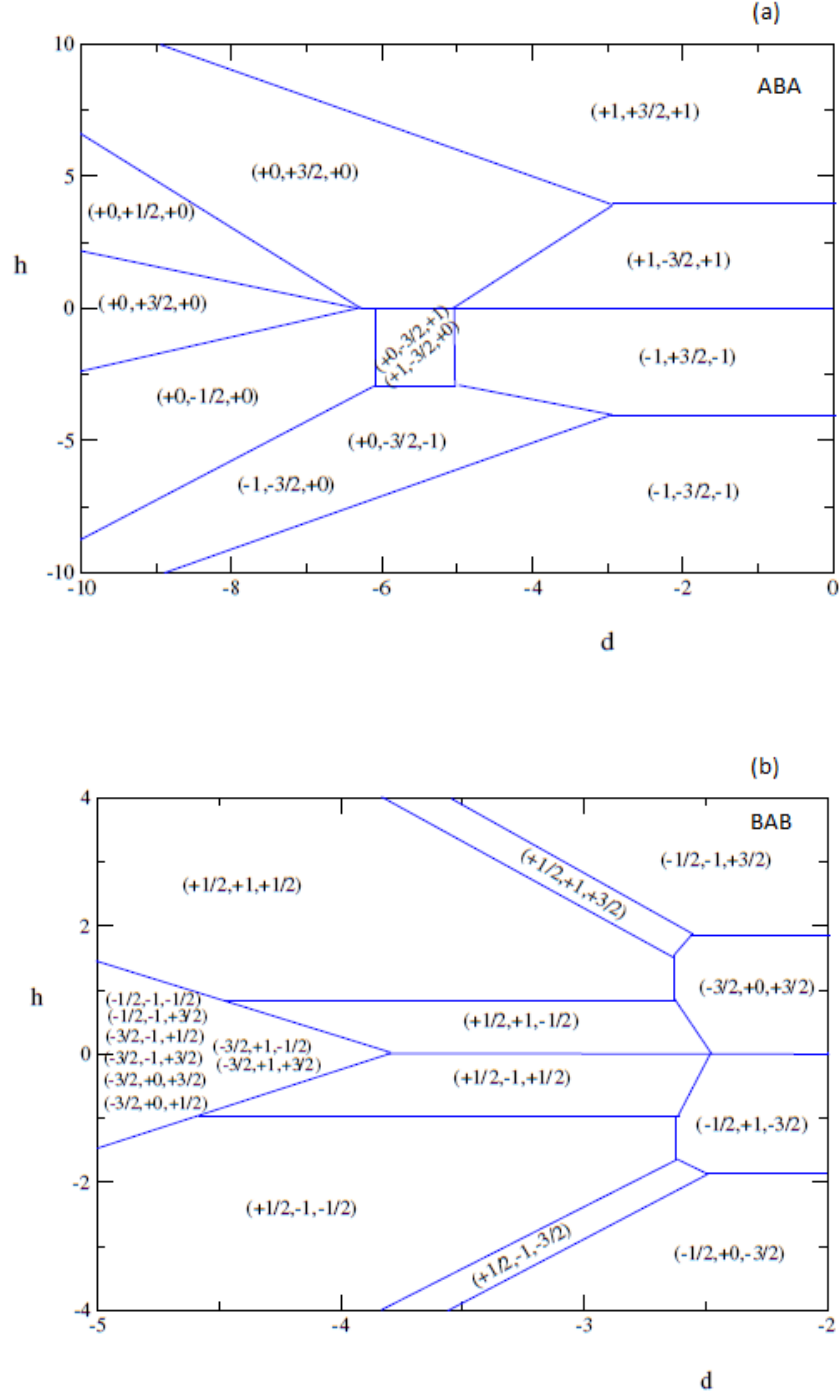


Fig. III.2 : Diagrammes des systèmes : (a) ABA dans le plan (d, h) , avec : $R_{BB} = 3$ et $R_{AB} = -1$ et BAB (b) dans le plan (d, h) , avec : $R_{BB} = 2$ et $R_{AB} = -0.8$.

III.1.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans cette deuxième partie, nous étudions, à l'aide des simulations Monte Carlo ($t \neq 0$) les effets des interactions de couplage d'échange, du champ magnétique externe et du champ cristallin

sur les propriétés magnétiques des deux systèmes considérés. Sur la Fig. III.3.a, nous présentons les aimantations partielles et totales pour le système ABA, dans le cas pur ($p = 1$), pour les interactions de couplage d'échange réduites $R_{BB}=3$ et $R_{AB}=-1$. Cette figure montre qu'en l'absence du champ magnétique externe et du champ cristallin ($h=0$ et $d=0$), l'aimantation m_2 est négative pour les valeurs à basse température, tandis que les aimantations m_1 , m_3 et m_{ABA} sont positives. Dans ce cas, la température de compensation, qui correspond à une aimantation totale nulle, apparaît pour $t_{comp} \approx 3.23$. Tandis que pour le système BAB, les résultats correspondants sont représentés sur la Fig. III.3.b, dans le cas pur, pour les valeurs fixes des paramètres réduit : $R_{BB}=2$ et $R_{AB}=-0.8$ et en l'absence des champs magnétique externe et cristallin. Dans ce système, la température de compensation est $t_{comp} \approx 2.67$.

Les aimantations partielles sont de signes opposés et l'aimantation totale est nulle. Pour $t = t_{comp}$, nous avons :

- Dans le cas du système ABA :

$$| (m_1 + m_3) t_{comp} | = | p m_2 (t_{comp}) | \quad (III.5)$$

- Dans le cas du système BAB :

$$| p (m'_1 + m'_3) t_{comp} | = | m'_2 (t_{comp}) | \quad (III.5')$$

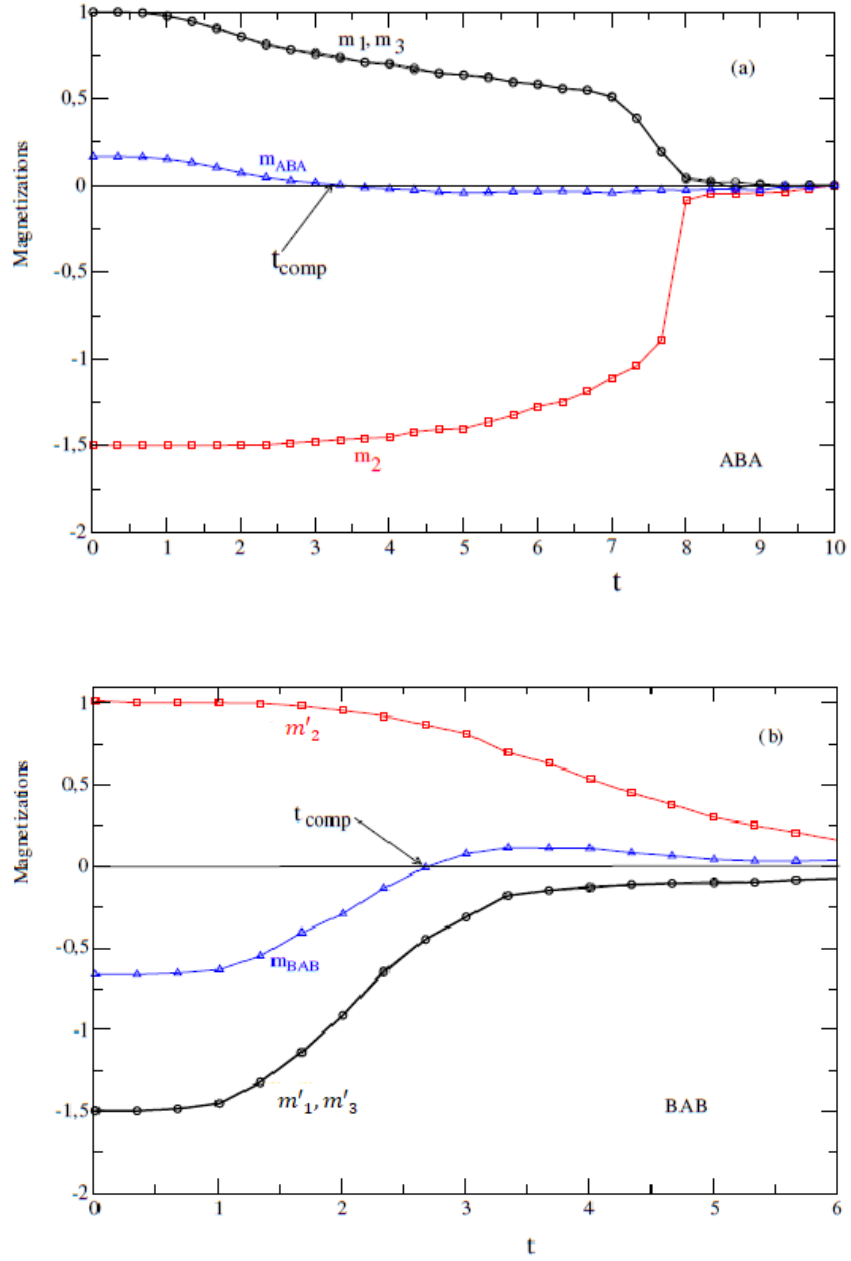


Fig. III.3 : Aimantations en fonction de la température réduite dans les systèmes ABA (a) et BAB (b), pour les valeurs fixes de R_{BB} et R_{AB} pour $p=1$, $d=0$ et $h=0$. En (a) $R_{BB}=3$ et $R_{AB} = -1$, en (b) $R_{BB}=2$ et $R_{AB} = -0.8$.

Nous présentons sur la Fig. III.4.a l'aimantation totale du système ABA en fonction de la température réduite, pour différentes valeurs du paramètre R_{BB} . Cette figure est tracée pour une valeur fixe du paramètre $R_{AB} = -1$, dans le cas pur ($p=1$), et en l'absence des champs magnétique externe et cristallin. Nous constatons que la température de compensation réduite pour le

système ABA dépend fortement du paramètre R_{BB} . Par contre, dans le système BAB, la température de compensation n'est pas affectée par la variation du paramètre de couplage R_{BB} , comme le montre la Fig. III.4.b. La valeur de cette température de compensation réduite est approximativement $t_{comp} \approx 2.57$. La Fig. III.4.b est obtenue pour $R_{AB} = -0.8$, $h=0$ et $d=0$ dans le cas pur.

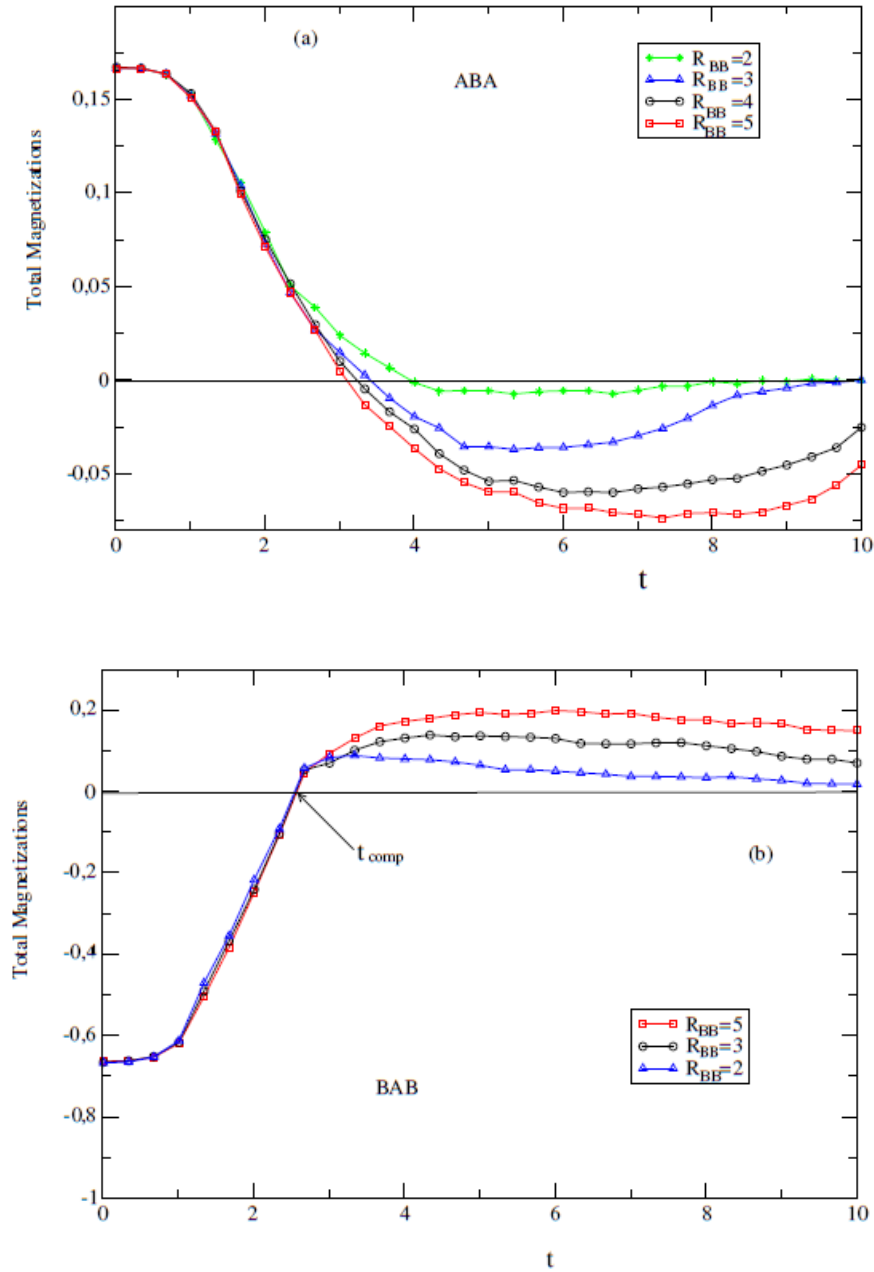
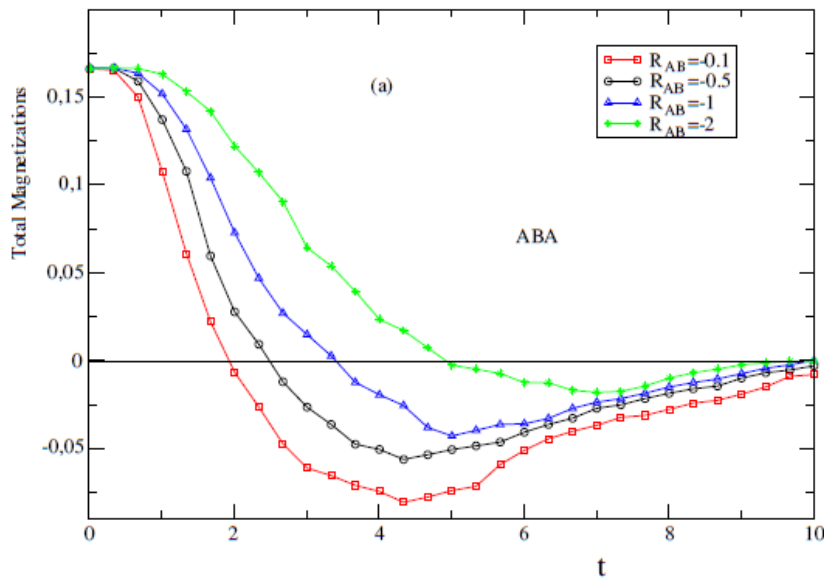


Fig. III.4 : Aimantations totales en fonction de la température réduite dans les systèmes ABA (a) et BAB (b), pour différentes valeurs de R_{BB} et pour des valeurs fixes de R_{AB} . En (a) $R_{AB}=-1$, en (b) $R_{AB} = -0.8$, pour $p=1$, $d=0$ et $h=0$.

Les Figs. III.5.a et III.5.b représentent la variation de l'aimantation totale respectivement pour les systèmes ABA et BAB en fonction de la température réduite, pour le cas pur ($p=1$). Ces figures sont présentées pour différentes valeurs de R_{AB} et pour une valeur fixe de R_{BB} . La Fig. III.5.a, tracée pour le paramètre $R_{BB}=3$, montre que la température de compensation augmente lorsque la valeur du paramètre R_{AB} augmente en valeur absolue. Cela est dû à l'augmentation du couplage entre les plans A et B. D'où une grande température est nécessaire pour qu'un tel comportement de compensation se produise. Cependant, pour de très basses températures, le paramètre R_{AB} n'a aucun effet sur l'aimantation totale, ce qui est en accord avec le diagramme de phase à l'état fondamental donné par la Fig. III.2.a. En outre, la Fig. III.5.b est établie pour $R_{BB}=2$. Nous en déduisons que la température de compensation diminue lorsque le paramètre R_{AB} augmente en valeur absolue jusqu'à atteindre la valeur $|-0.5|$. Sans disque, pour $R_{AB} < -0.5$, la température de compensation augmente. Ce changement de comportement est probablement dû à la compétition entre les phases ferromagnétique et antiferromagnétique lors du choix de $R_{BB}=2$ et la valeur négative de R_{AB} . Par contre, pour les très basses températures, l'aimantation totale n'est pas influencée par la variation de R_{AB} . Encore une fois, ce comportement est en accord avec la Fig. III.2.b du diagramme de phase de l'état fondamental.



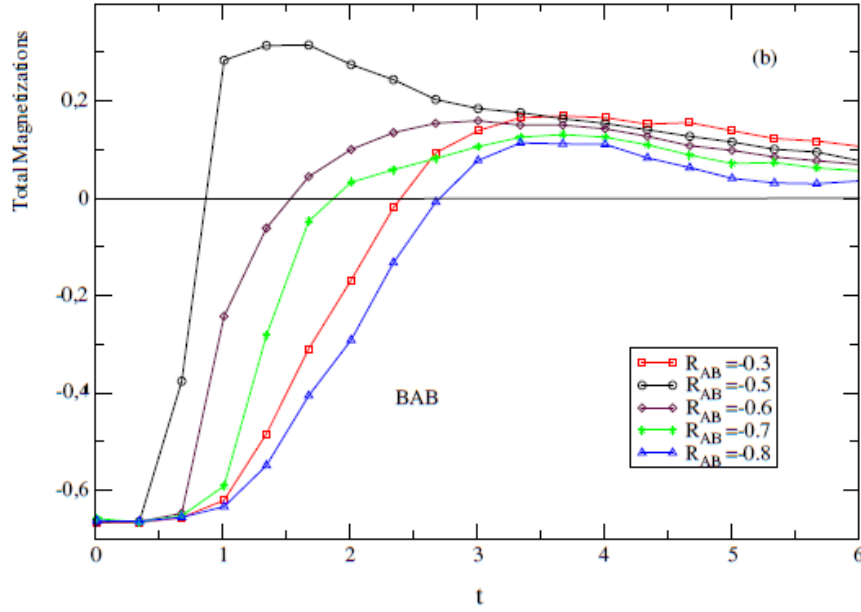


Fig. III.5 : Aimantations totale en fonction de la température réduite dans les systèmes ABA (a) et BAB (b), pour différentes valeurs de R_{AB} et pour des valeurs fixes de R_{BB} . Dans (a) $R_{BB}=3$, dans (b) $R_{BB}=2$, pour $p=1$, $d=0$ et $h=0$.

Afin d'étudier l'effet de la probabilité de dilution sur les atomes B dans les systèmes ABA et BAB, nous illustrons sur les Fig. III.6.a et III.6.b la variation de l'aimantation totale en fonction de la température réduite, respectivement. Ces figures sont données pour différentes valeurs de la dilution p , en l'absence des champs magnétique externe et cristallin. La Fig. III.6.a correspond à des valeurs fixes de $R_{BB}=10$ et $R_{AB}=-0.1$, tandis que la Fig. III.6.b est tracée pour $R_{BB}=2$ et $R_{AB}=-0.8$. La Fig. III.6.a montre que lorsque la probabilité p diminue (la dilution des atomes de B augmente), la température de compensation augmente. Ce résultat est dû au fait que la dilution ne concerne que les atomes B et que les atomes dominants dans le système ABA sont dans les plans A avec des spins $S=\pm 1$. Alors que dans le système BAB, la température de compensation augmente en diminuant la probabilité de $p=1$ à 0.8.

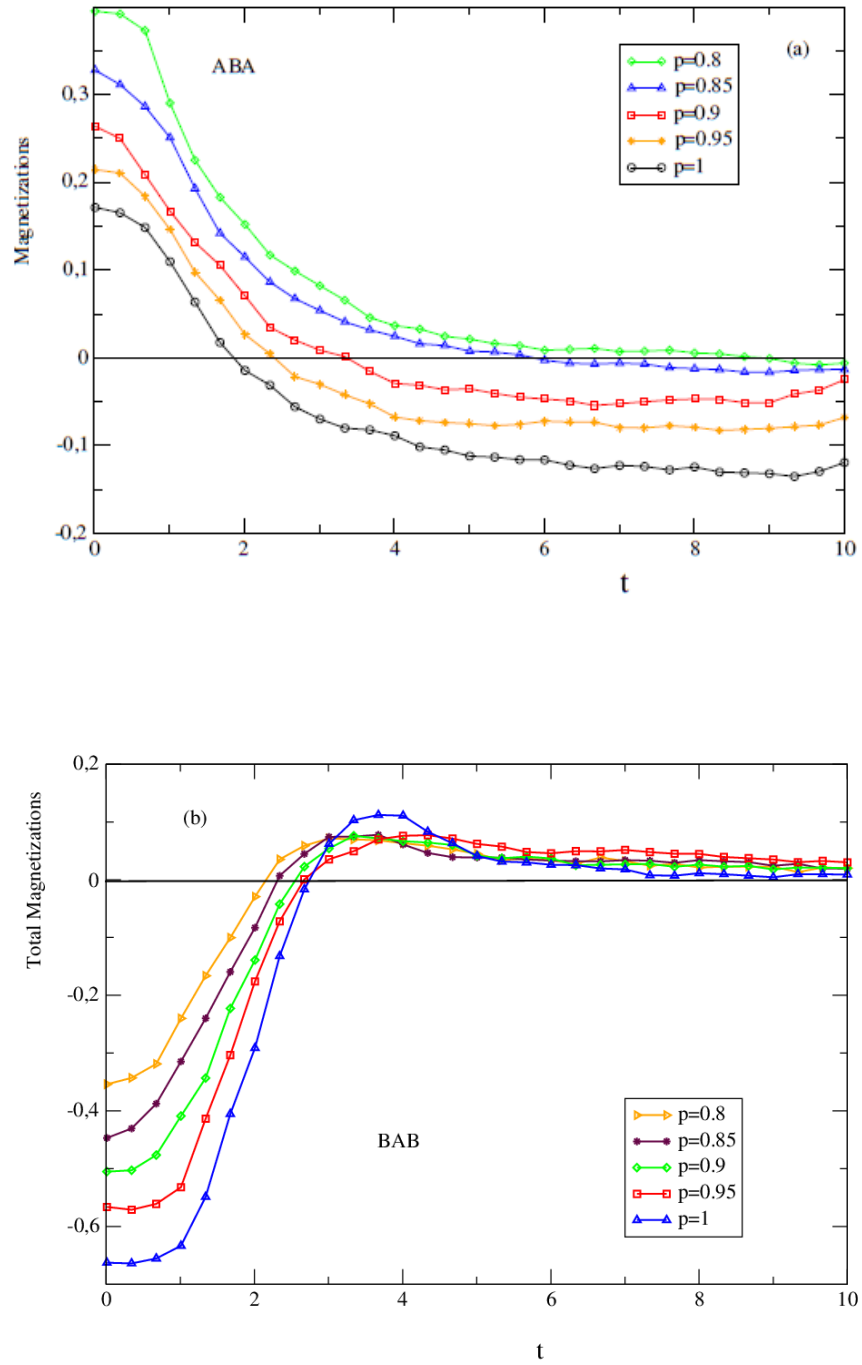


Fig. III.6 : Aimantation totale en fonction de la température réduite dans les systèmes ABA (a) et BAB (b), pour différentes valeurs de (p) et pour des valeurs fixes de R_{BB} et R_{AB} . En (a) $R_{BB}=10$ et $R_{AB}=-0.1$, en (b) $R_{BB}=2$ et $R_{AB}=-0.8$, pour $d=0$ et $h=0$.

Sur la Fig. III.7.a, nous traçons pour le système ABA les aimantations totales en fonction du champ cristallin réduit d , pour les valeurs fixes des paramètres $R_{BB}=3$, $R_{AB}=-1$, $t=0.5$ et pour différentes valeurs de la probabilité p , en l'absence du champ magnétique externe réduit ($h=0$). Cette figure présente un champ cristallin de compensation d_{comp} qui correspond au cas où l'aimantation totale du système est nulle. Nous trouvons que le champ cristallin de compensation est presque constant ($d_{comp} \simeq -2.8$) pour toutes les valeurs de probabilité de dilution. Sur cette figure, nous distinguons trois régions différentes, à savoir : $d < -4.2$, $-4.2 < d < -2.5$ et $d > -2.5$. Dans la première région, les aimantations totales restent constantes. Dans la deuxième région, une diminution abrupte se produit, tandis que dans la dernière région, les aimantations totales augmentent et deviennent constantes. Dans toutes ces régions, la diminution du paramètre p conduit à l'augmentation des aimantations totales pour une valeur fixe du champ cristallin d . En outre, pour examiner l'effet de la dilution et du champ cristallin sur le système BAB, nous illustrons sur la Fig. III.7.b les aimantations totales pour $R_{BB}=2$, $R_{AB}=-0.8$, $t=0.5$ et les valeurs sélectionnées de la probabilité p . À partir de cette figure, on note que pour les probabilités inférieures à 0.9, le système présente deux valeurs d_{comp} , tandis que trois valeurs d_{comp} sont trouvées pour le système presque pur ($p \geq 0.9$). Sur cette figure, nous distinguons quatre régions : $d < -3$, $-3 < d < -1$, $-1 < d < 4$ et $4 < d$. Les aimantations totales sont constantes dans la première région. Dans la deuxième région, on trouve une augmentation de l'aimantation totale. Les aimantations totales présentent un minimum dans la troisième région, sauf dans le cas pur ($p = 1$). Dans la dernière partie, les aimantations totales ne sont pas affectées par l'augmentation du champ cristallin. En outre, pour les valeurs positives de d , l'effet de la dilution est nettement important.

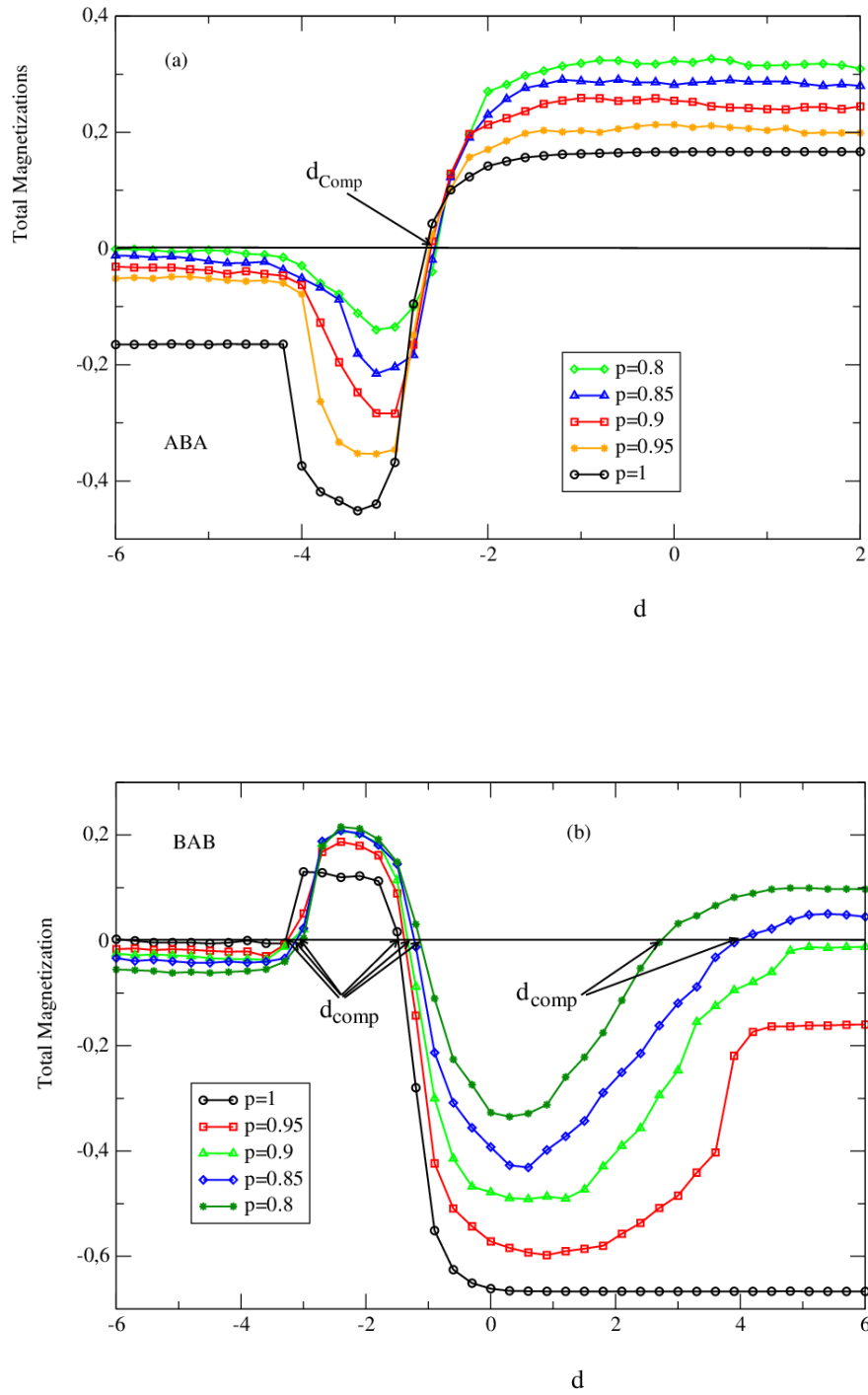


Fig. III.7 : Aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit dans les systèmes ABA (a) et BAB (b), pour différentes valeurs de (p) et pour des valeurs fixes de R_{BB} et R_{AB} . En (a) $R_{BB}=3$ et $R_{AB} = -1$, en (b) $R_{BB}=2$ et $R_{AB}=-0.8$, pour les valeurs fixes : $t=0.5$ et $h=0$.

III.2 Effets de la dilution sur la température de compensation dans la structure cœur-coquille du borophene : simulations de Monte Carlo

III.2.1 Introduction

Le Borophene est l'un des nouveaux matériaux 2D, ce matériau a été synthétisé expérimentalement sur une surface d'argent [149, 150]. Cette structure a plusieurs applications dans les batteries [151-154]. Le bore étant proche du carbone dans le tableau périodique, les propriétés chimiques de la structure du borophene sont similaires à celles du graphène [155]. Les propriétés magnétiques, électroniques et mécaniques de la structure borophene ont été étudiées [156-160]. La structure borophene B_{36} est très stable, elle a été étudiée expérimentalement et théoriquement [161]. De plus, les propriétés magnétiques à savoir les susceptibilités et les boucles d'hystérésis de la structure borophene ont également été étudiées [162, 163].

Dans ce travail, nous utilisons les simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis pour étudier un système constitué d'une structure borophene cœur-coquille, avec des spins entiers ($\sigma = \pm 1, 0$) dans le cœur et demi-entiers ($S = \pm 3/2, \pm 1/2$) dans la coquille. L'originalité de ce travail réside dans le fait de prendre en compte la dilution dans la partie coquille du système.

III.2.2 Présentation du système et de l'hamiltonien

La structure cœur-coquille du borophene est étudiée avec des conditions aux limites libres. Le système est composé de spins $\sigma = \pm 1, 0$ et $S = \pm 3/2, \pm 1/2$. Le nombre total de spins du système est $N = N_\sigma + N_S = 210$ avec $N_\sigma = 36$ (dans le cœur) et $N_S = 174$ (dans la coquille). La partie coquille est diluée de manière aléatoire avec des atomes non magnétiques (voir Fig. III.8).

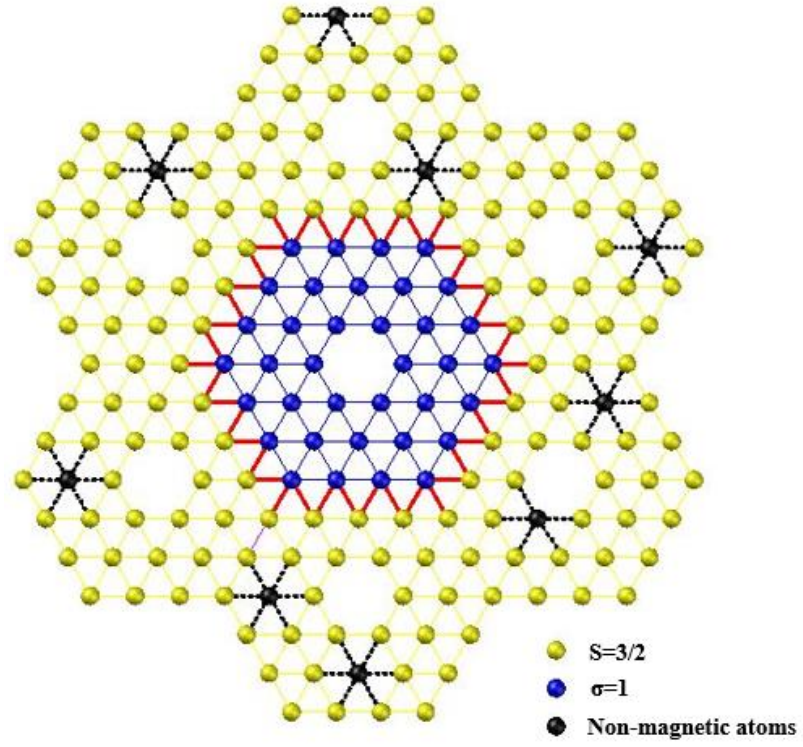


Fig. III.8: Représentation schématique de la structure cœur-coquille du borophene avec 5% d'atomes non-magnétiques.

L'hamiltonien de la structure borophene étudiée est défini comme suit :

$$\mathcal{H} = -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i S_i \varepsilon_j S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_{S\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i S_i \sigma_j - H \left(\sum_i \varepsilon_i S_i + \sum_j \sigma_j \right) - \Delta_S \sum_i \varepsilon_i^2 S_i^2 - \Delta_\sigma \sum_j \sigma_j^2 \quad (\text{III. 2})$$

où J_{SS} , $J_{\sigma\sigma}$ et $J_{S\sigma}$ sont les interactions de couplage d'échange entre toutes les paires de plus proches voisins S-S, σ - σ et S- σ , respectivement. En effet, J_{SS} et $J_{\sigma\sigma}$ décrivent les interactions ferromagnétiques, tandis que $J_{S\sigma}$ décrit l'interaction ferrimagnétique. H est le champ magnétique externe. Les champs cristallins des spins S et σ sont respectivement Δ_S et Δ_σ . En raison de simplification de nos calculs, nous considérons le cas $\Delta = \Delta_S = \Delta_\sigma$. Le paramètre ε_i est une variable non corrélée, prise égale à 1 avec la probabilité P pour les sites magnétiques ou égale à 0 avec la probabilité P' pour les sites non magnétiques ($P'=1-P$). En fait, le cas $P'=0$

correspond au cas où tous les sites sont magnétiques ; tandis que $P'=1$ si tous les sites sont non-magnétiques.

Pour plus de simplification, nous prenons les paramètres réduits comme suit : $R_1=J_{SS}/J_{\sigma\sigma}$, $R_2=J_{S\sigma}/J_{\sigma\sigma}$, $h=H/J_{\sigma\sigma}$, $d=\Delta/J_{\sigma\sigma}$ et température $t=T/J_{\sigma\sigma}$.

III.2.3 Résultats et discussion

Dans cette section, nous discuterons nos résultats obtenus par des simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. Dans la sous-section III.2.3.1, nous commençons par étudier les diagrammes de phase à l'état fondamental. Après, dans la sous-section III.2.3.2, nous traitons le comportement des aimantations totales en fonction de la température, l'effet de la concentration de dilution et l'effet du champ cristallin réduit et du champ magnétique externe pour des températures non nulles.

III.2.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans cette sous-section, nous présentons sur les Figs. III.9, les diagrammes de phase de l'état fondamental d'un spin ($S = \pm 3/2, \pm 1/2$) le nombre d'états $= 2S+1=4$ et ($\sigma=\pm 1, 0$) le nombre d'états $= 2\sigma+1=3$. Nous avons appliqué le modèle Blume-Capel [164] pour la structure borophene cœur-coquille. Pour chacune des $4 \times 3=12$ configurations possibles, nous calculons l'énergie correspondante. Après calcul de l'énergie des 12 configurations possibles, la plus stable est celle ayant l'énergie minimale. Ainsi, nous balayons tout l'espace des phases en fixant les différents paramètres physiques notamment les interactions de couplage d'échange réduites, les champs magnétiques externes et cristallins réduits.

La Fig. III.9.a est tracée dans le plan (h, d), pour la valeur fixe des paramètres réduits $R_1 = 0.1$ et $R_2 = -0.5$. Sur cette figure, seules dix configurations stables sont obtenues : $(0, +1/2)$; $(+1, +1/2)$; $(+1, +3/2)$; $(-1, +1/2)$; $(-1, +3/2)$; $(0, -1/2)$; $(-1, -1/2)$; $(-1, -3/2)$; $(+1, -1/2)$ et $(+1, -3/2)$. Une symétrie parfaite est observée par rapport à l'axe du champ magnétique externe réduit $h=0$.

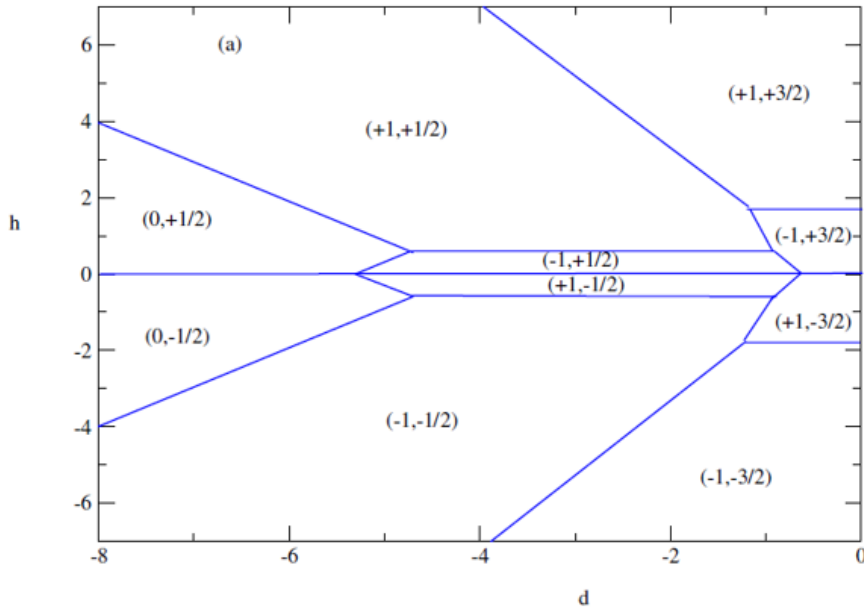
La Fig. III.9.b est présentée dans le plan (h, R_2) pour $R_1=0.1$ et $d=0$. Nous constatons que seules quatre phases stables sont obtenues et correspondent aux valeurs maximales des spins : $(-3/2, -1)$; $(-3/2, +1)$; $(+3/2, -1)$ et $(+3/2, +1)$.

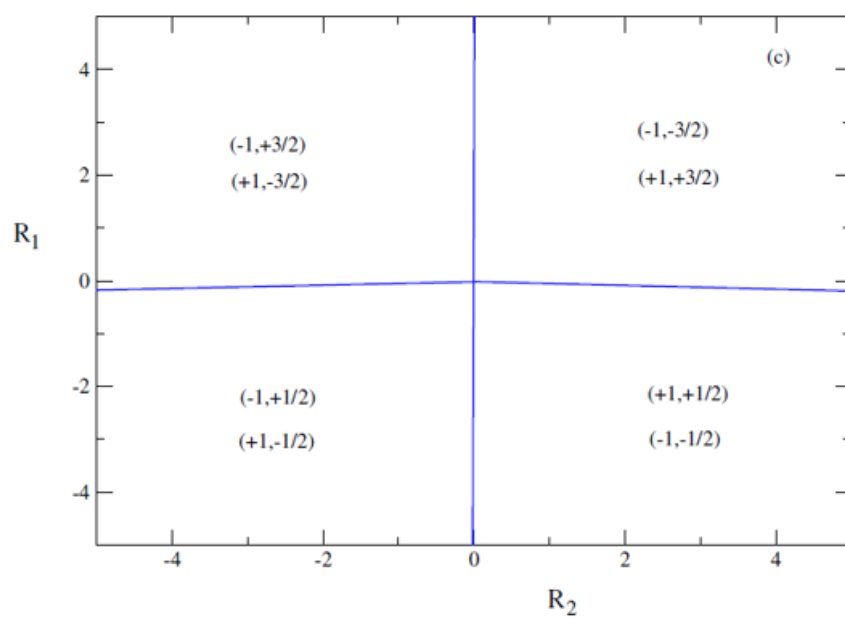
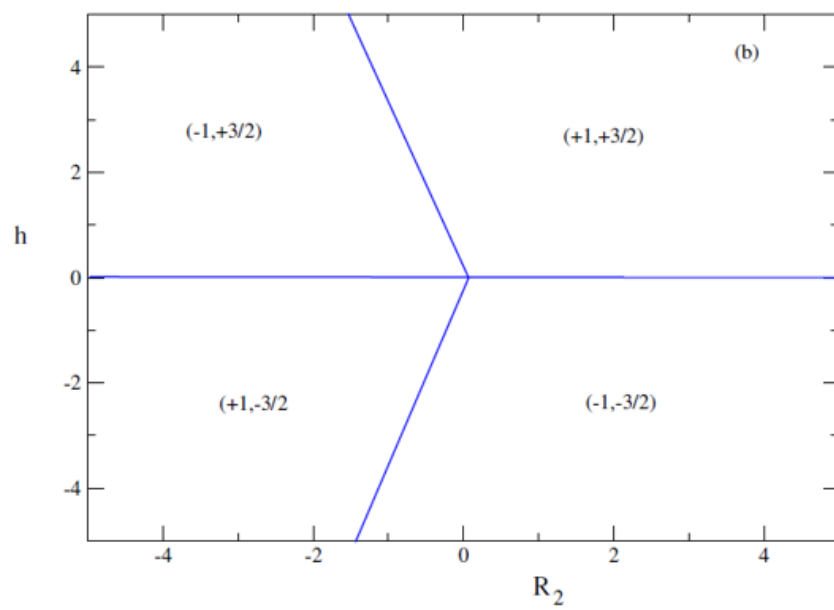
La Fig. III.9.c correspond au plan (R_1, R_2) pour $h=0$ et $d=0$. Dans ce plan, il existe huit configurations stables à savoir : $(-1, +3/2)$; $(+1, -3/2)$; $(-1, -3/2)$; $(+1, +3/2)$; $(-1, +1/2)$; $(+1, -1/2)$; $(-1, -1/2)$ et $(+1, +1/2)$.

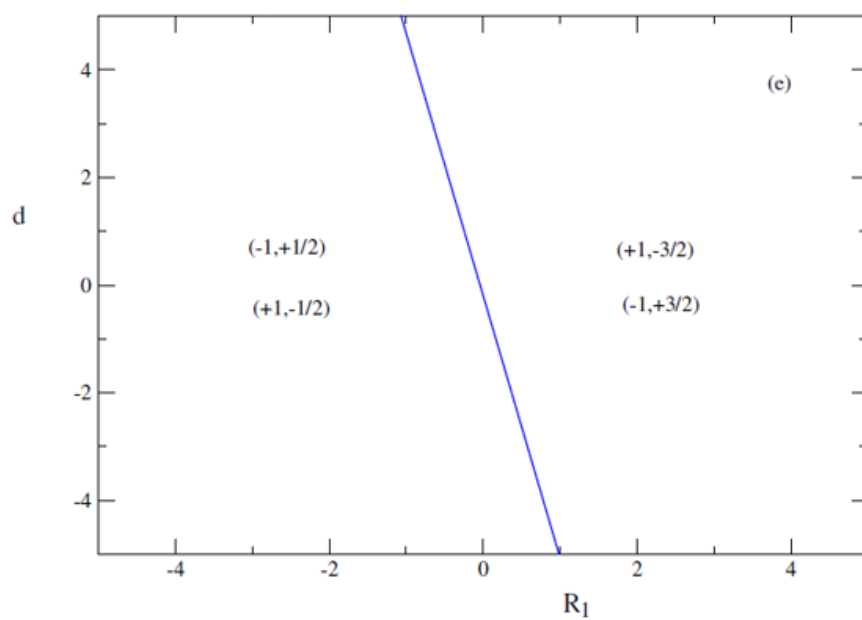
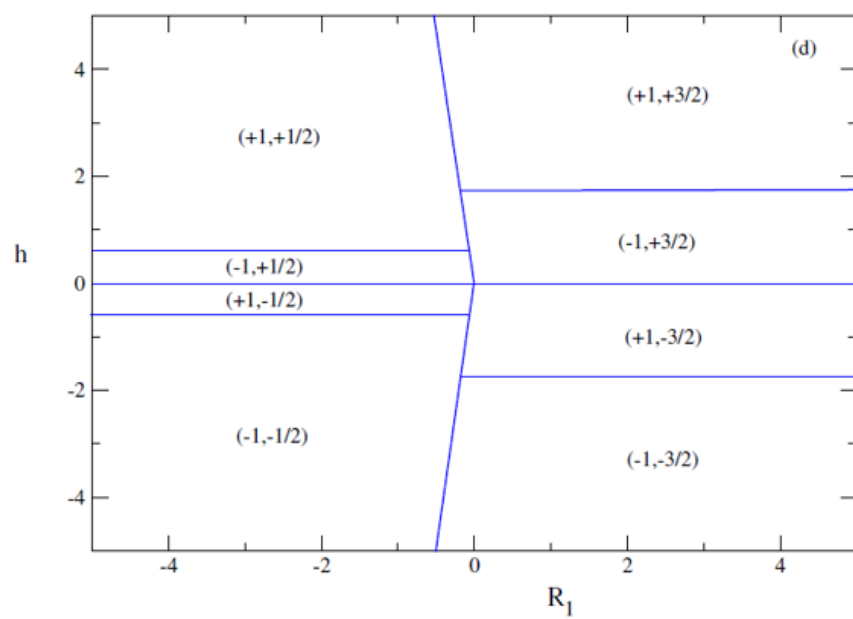
La Fig. III.9.d illustre le diagramme de phase dans le plan (h, R_1) , pour $d=0$ et $R_2 = -0.5$. Cette figure montre la présence de quatre phases stables lorsque le paramètre de couplage d'échange réduit R_1 est positif et de quatre phases stables lorsque ce paramètre est négatif. Ces huit phases stables sont : $(+1, +1/2)$; $(-1, +1/2)$; $(+1, +3/2)$ et $(-1, +3/2)$ pour $h < 0$ et $(+1, -1/2)$; $(-1, -1/2)$; $(+1, -3/2)$ et $(-1, -3/2)$ pour $h > 0$. De plus, comme le montrent les Fig. III.9.a et III.9.b, nous avons toujours une symétrie parfaite par rapport à l'axe du champ magnétique $h=0$.

Dans la Fig. III.9.e, nous présentons le plan (d, R_1) en l'absence du champ magnétique externe réduit et pour $R_2 = -0.5$. Cette figure ne montre que quatre configurations stables qui sont : $(-1, +1/2)$; $(+1, -1/2)$; $(-1, +3/2)$ et $(+1, -3/2)$.

Enfin, l'effet du paramètre réduit R_2 est exploré. En effet, nous traçons la Fig. III.9.f dans le plan (d, R_2) pour $R_1 = 0.1$ et $h = 0$. Nous obtenons les huit phases stables déjà trouvées sur la Fig. III.9.d à savoir $(+1, +1/2)$; $(-1, +1/2)$; $(+1, +3/2)$; $(-1, +3/2)$; $(+1, -1/2)$; $(-1, -1/2)$; $(+1, -3/2)$; $(-1, -3/2)$ en plus des deux autres phases stables qui sont $(0, -1/2)$ et $(0, +1/2)$.







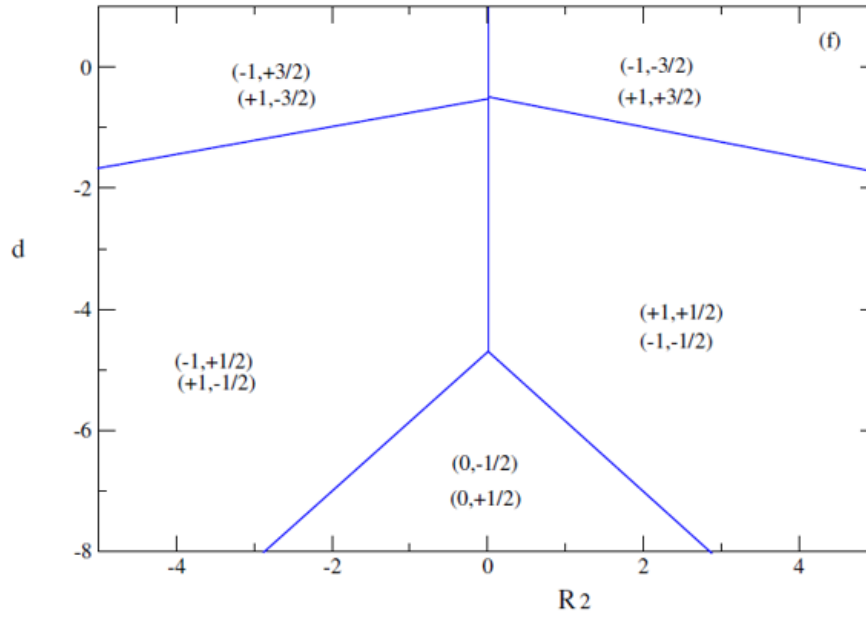


Fig. III.9 : Diagrammes de phase de l'état fondamental : (a) $R_1=0.1$ et $R_2 = -0.5$, (b) $R_1 = 0.1$ et $d=0$, (c) $d=0$ et $h=0$, (d) $R_2 = -0.5$ et $d=0$, (e) $R_2 = -0.5$ et $h=0$, (f) $R_1=0.1$ et $h=0$.

III.2.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans cette section, nous étudions les propriétés magnétiques de la structure cœur-coquille du borophene à l'aide de simulations Monte Carlo (MCS) sous l'algorithme Metropolis. En effet, sur les Figs. III.10.a et III.10.b, nous commençons par l'étude des comportements d'aimantation et de susceptibilité partielles et totales dans le cas où le système est totalement magnétique ($P'=0$). Ces figures sont tracées en l'absence de champ cristallin et pour les paramètres réduits fixes $R_1 = 0.1$ et $R_2 = -0.5$. Les aimantations à très basse température sont $M_\sigma = +1$, $M_S = -3/2$ et $M_{\text{tot}} = \frac{(1 \times 36) + (-3/2 \times 174)}{(36 + 174)} = -1.07$, respectivement. Ces valeurs sont en bon accord avec celles des spins ($\sigma = \pm 1$, 0 et $S = \pm 3/2$, $\pm 1/2$) trouvées dans les diagrammes de phase de l'état fondamental présentés dans la sous-section III.2.3.1.

Au point $t = t_{\text{comp}}$, l'aimantation totale s'annule car la valeur de l'aimantation du cœur est égale et opposée à celle de la coquille. En effet, cette situation est due à la compétition entre plusieurs paramètres physiques, à savoir : d , h , R_1 et R_2 . Cette température de compensation réduite vaut environ $t_{\text{comp}} \approx 1.5$. En ce point, le système est dans une phase super-paramagnétique. Pour des températures réduites assez élevées ($t > 6$), le système se trouve dans la phase paramagnétique ($M_{\text{tot}}=0$).

De plus, la Fig. III.10.b est tracée pour les mêmes paramètres que sur la Fig. III.10.a. Cette figure présente les susceptibilités partielles (χ_S, χ_σ) et totale (χ_{tot}) du système. La susceptibilité totale présente deux pics. Le premier pic correspond au point d'inflexion pour $t \approx 1$, tandis que le second est lié à la température de transition réduite $t_r \approx 4.2$ entre les phases ferrimagnétique et paramagnétique.

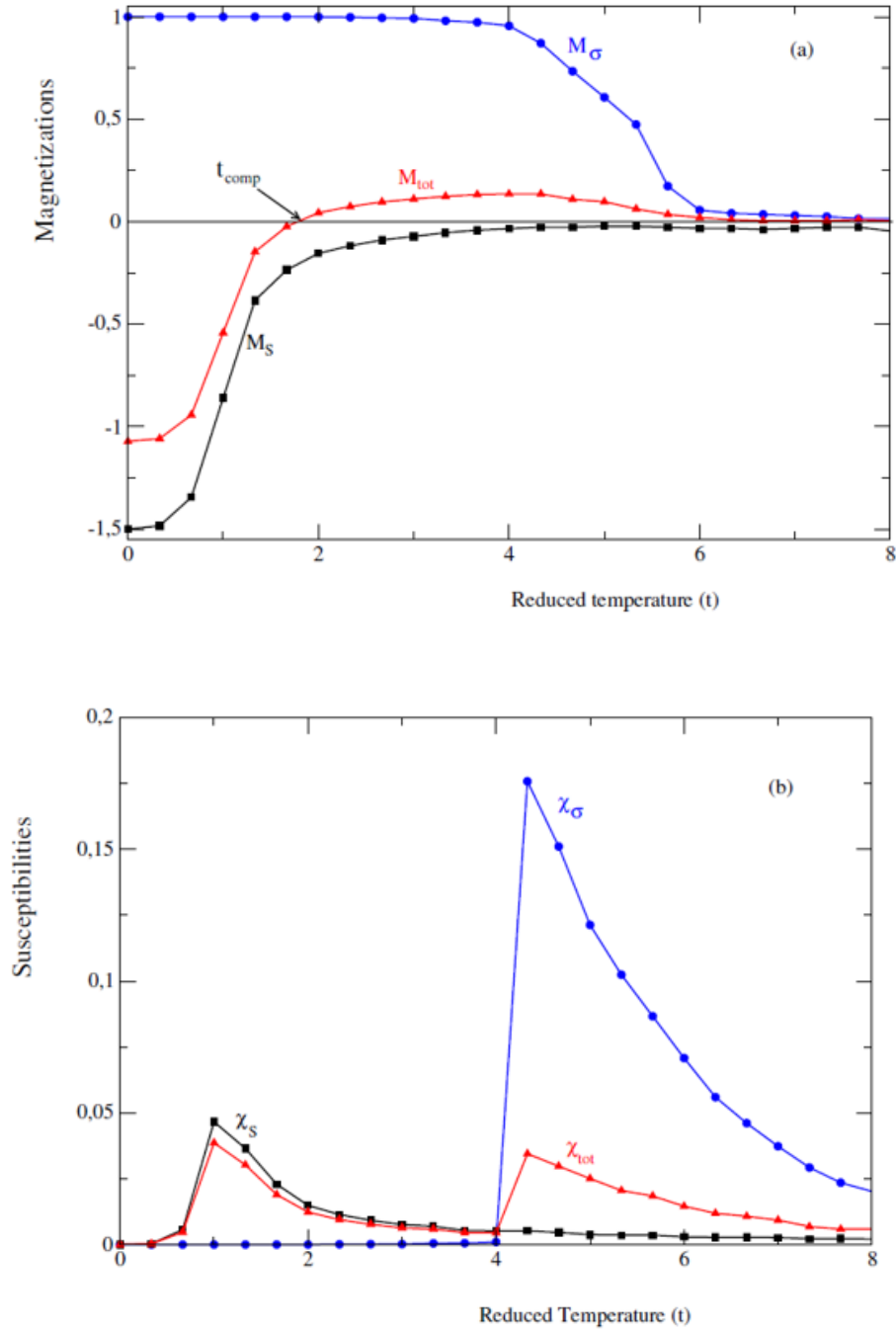
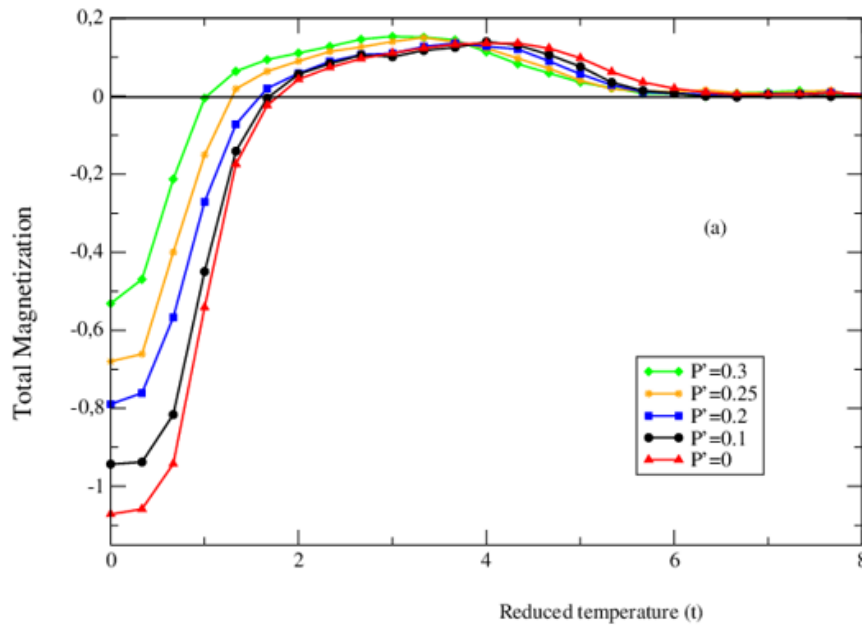


Fig. III.10: (a) Aimantations et (b) susceptibilités par rapport à la température réduite pour les valeurs : $d=0$, $h=0$, $P'=0$, $R_1=0.1$ et $R_2=-0.5$.

En outre, nous illustrons sur la Fig. III.11.a l'aimantation totale, pour différentes valeurs de la concentration de dilution P' , en l'absence du champ magnétique externe et cristallin ($h=0$ et $d=0$) pour les valeurs des paramètres fixes : $R_1=0.1$ et $R_2=-0.5$. À partir de cette figure, l'effet de la concentration de dilution P' sur l'aimantation totale est clairement observé. En effet, lorsque la concentration de dilution P' augmente, la valeur de la température de compensation réduite diminue. Ceci s'explique par le fait que la diminution du nombre d'atomes magnétiques dans la coquille permet d'atteindre rapidement la phase paramagnétique. En outre, sur la Fig. III.11.b, nous présentons la susceptibilité totale pour les mêmes valeurs des paramètres fixés que sur la Fig. III.11.a. La susceptibilité totale présente deux pics, le premier correspond au point d'inflexion tandis que le second est lié à la température de transition. Cependant, l'augmentation de la concentration de dilution P' fait déplacer les pics qui correspondent aux points d'inflexion vers les basses températures, conformément aux résultats obtenus sur la Fig. III.11.a.



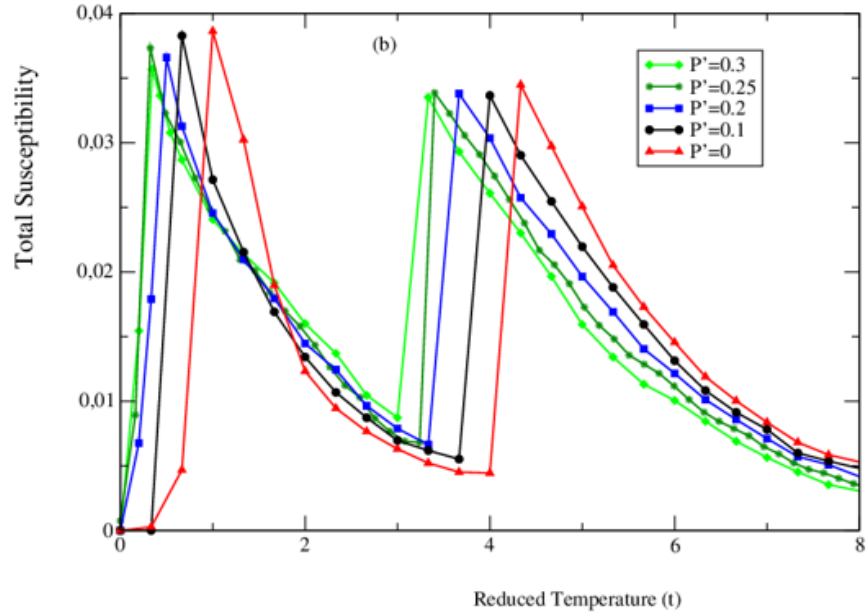


Fig. III.11 : (a) Aimantation totale (b) Susceptibilité totale en fonction de la température réduite pour $d=0$, $h=0$, $R_1=0.1$ et $R_2 = -0.5$.

Pour mettre en évidence l'effet de la concentration de dilution P' sur la température de compensation réduite, nous présentons sur la Fig. III.12 les résultats obtenus dans le cas où $d=0$, $h=0$, $R_1=0.1$ et $R_2=-0.5$. Cette figure montre clairement que l'augmentation de la concentration de dilution P' entraîne une diminution de la température de compensation réduite. La chute de cette courbe est plus importante pour $0.2 \leq P' \leq 0.3$ que pour $P' < 0.2$ ($P' = 0.2$ correspond à une dilution de 20%). Cela signifie que lorsque la dilution est importante, la température de compensation réduite tend rapidement vers les petites valeurs. La température de compensation réduite prend sa plus grande valeur dans le cas pur ($P'=0$) qui est $t_{comp} \approx 1.8$.

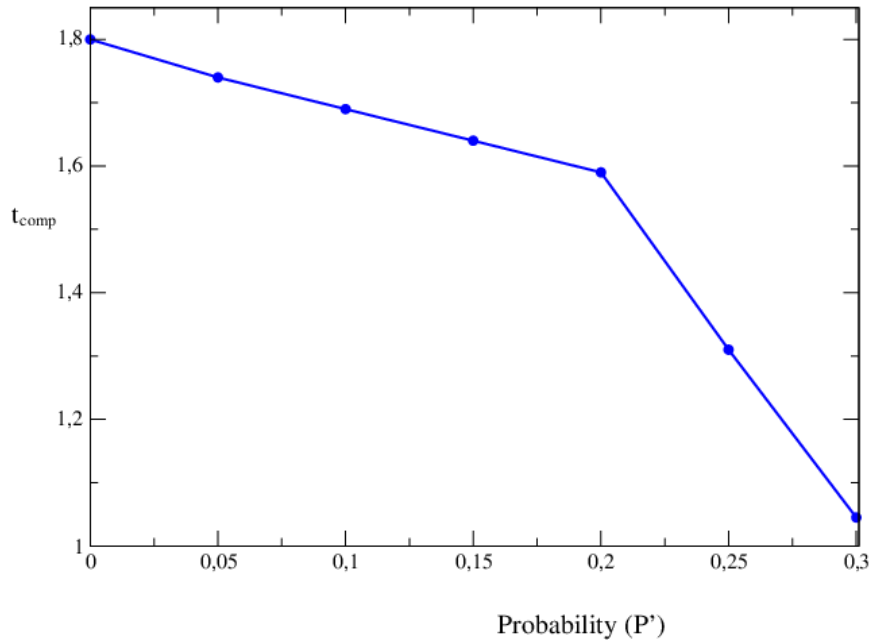


Fig. III.12 : Température de compensation réduite en fonction de la probabilité de dilution P' pour $d=0$, $h=0$, $R_1 = 0.1$ et $R_2 = -0.5$.

Par ailleurs, nous illustrons sur la Fig. III.13, le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit d , pour différentes valeurs de concentration de dilution ($P'=0, 0.1, 0.2$ et 0.3). Cette figure est tracée pour les paramètres réduits fixes $t=0.5$, $h=2$, $R_1 = 0.1$ et $R_2 = -0.5$. Nous constatons que l'aimantation ne présente que deux intervalles de variation dans le cas pur ($P'=0$) et trois intervalles dans le cas dilué ($P' \neq 0$). En effet, pour $d < -1$ et indépendamment du paramètre P' , l'aimantation totale subit une transition du premier ordre pour $P' = 0.2$ et 0.3 tandis que la transition est de second ordre pour $P'=0$ et 0.1 . En fait, les aimantations totales subissent une transition du premier ordre lors de l'augmentation du paramètre P' , ce qui est directement lié au fait que l'accroissement du paramètre P' conduit à l'augmentation des atomes non magnétiques dans le système. Ainsi, lorsque la concentration de dilution P' augmente, le nombre total de spins dans le système diminue, entraînant une diminution des aimantations. En outre, pour $d > 4$, l'aimantation totale du système atteint sa saturation pour toutes les valeurs du paramètre P' .

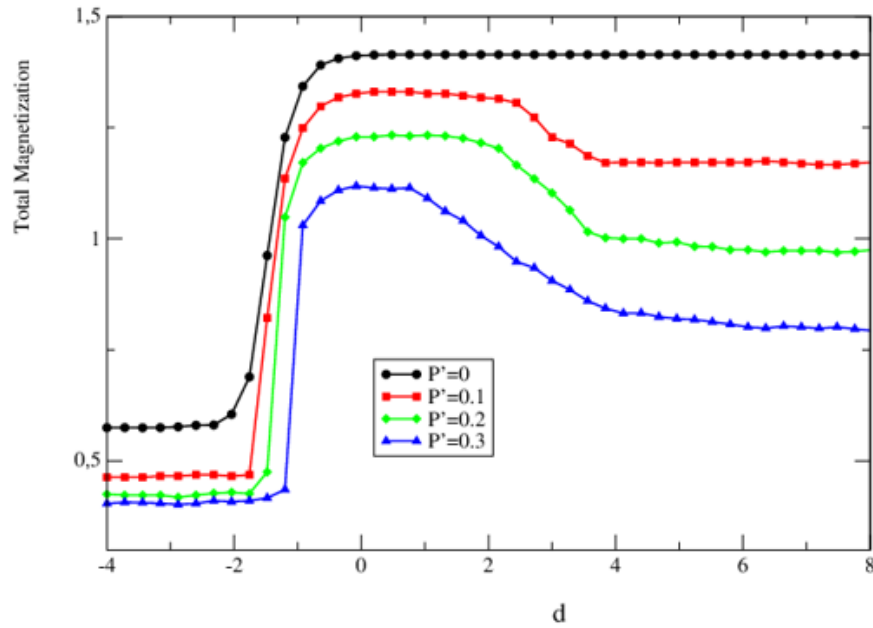


Fig. III.13 : Aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit pour $t=0.5$, $h=2$, $R_1=0.1$ et $R_2=-0.5$ pour des valeurs spécifiques de la concentration de dilution ($P'=0, 0.1, 0.2$ et 0.3).

Enfin, nous présentons sur les Figs. III.14.a et III.14.b les cycles d'hystérésis en l'absence du champ cristallin réduit ($d=0$). La Fig. III.14.a est donnée pour différentes valeurs de concentrations de dilution ($P'=0, 0.1$ et 0.2) et pour les valeurs des paramètres réduits $R_1=0.1$, $R_2=-0.5$ et $t=0.5$. Cette figure montre que lors de l'augmentation de la concentration de dilution P' , les surfaces des boucles diminuent donnant naissance à une décroissance du champ coercitif. Un tel résultat est lié à la diminution de l'aimantation totale du système à cause de la dilution. De plus, trois boucles d'hystérésis sont observées sur la Fig. III.14.a. En effet, le mécanisme des boucles multiples peut s'expliquer par la compétition entre les interactions de couplage d'échange, les champs magnétiques externe et cristallin [160]. En outre, la valeur de saturation de l'aimantation totale diminue avec l'augmentation de la dilution.

Pour terminer cette étude, nous représentons sur la Fig. III.14.b les cycles d'hystérésis pour plusieurs valeurs de température réduite ($t=0.5, 1, 3$ et 5) et pour des paramètres fixes $R_1=0.1$, $R_2=-0.5$ et $P'=0$. Nous constatons que lorsque la température réduite augmente, le système tend vers la phase paramagnétique caractérisée par une diminution des surfaces boucles. Nous remarquons également que le champ coercitif diminue lors de l'augmentation de la valeur de température réduite, voir Fig. III.14.b. En effet, un tel comportement s'explique par l'augmentation de l'agitation thermique conduisant à une phase désordonnée (paramagnétique).

Par ailleurs, en augmentant la valeur de la température réduite au-dessus de $t=3$, les deux boucles correspondantes disparaissent simultanément. Un comportement similaire a déjà été présenté dans les réf. [165, 166].

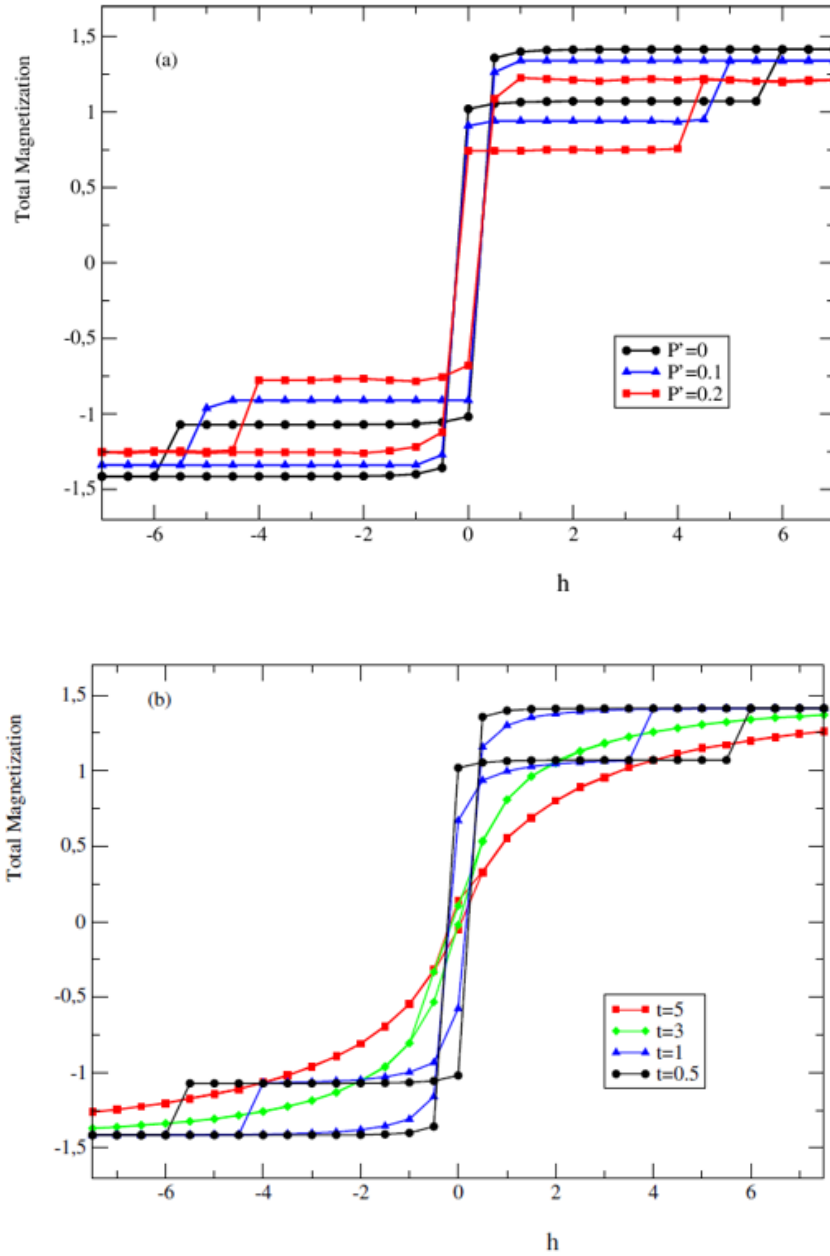


Fig. III .14 : Cycles d'hystérésis magnétique en l'absence de champ cristallin réduit : (a) pour $R_1=0.1$, $R_2=-0.5$ et $t=0.5$, (b) pour $R_1 = 0.1$, $R_2= -0.5$ et $P'=0$.

III.3 Comportements de l'aimantation et de la compensation dans la nano-structure d'ovalène anti-ferrimagnétique à spins mixtes (7/2, 1)

III.3.1 Introduction

Les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) sont des molécules constituées d'atomes de carbone et d'hydrogène tels que le coronene $C_{24}H_{12}$, le corannulène $C_{20}H_{10}$ et le pyrène $C_{16}H_{10}$. Les (HAP) ont fait l'objet de plusieurs recherches scientifiques [102-104]. Des applications de ces molécules en nanotechnologie ont été réalisées [105-107]. L'ovalène est un HAP composé de dix cycles benzéniques fusionnés de formule chimique $C_{32}H_{14}$. Le comportement à la fusion de la nano-structure organique ovalène à l'aide de simulations de dynamique moléculaire a été discuté [167]. Des calculs par la méthode de la densité fonctionnelle (DFT) sur les structures d'ovalène contenant du deutérium ont été effectués [168]. Ces dernières années, l'intérêt pour les matériaux ferrimagnétiques a augmenté. Ces systèmes présentent d'importantes applications technologiques [169-172]. En effet, plusieurs études expérimentales ont été réalisées sur la structure d'ovalène, notamment les effets du solvant sur la vie pure des rayonnements purs ovaléniques [109] et la distinction des molécules de précurseurs de suie gazeuse et des particules de précurseurs de suie par spectrométrie de masse à photoionisation [108]. De plus, il y a lieu de trouver deux points de compensation dans un système ferromagnétique d'Ising décoré [173]. L'objectif de ce travail est d'étudier les propriétés magnétiques d'une structure ovalène à spins mixtes (7/2,1) avec les simulations de Monte Carlo.

III.3.2 Modèle, hamiltonien et présentation du nano-système

Dans ce travail, nous étudions les propriétés magnétiques d'une nano-structure d'ovalène constituée de spins mixtes entier $S=\pm 1$ et demi-entier $\sigma=\pm 7/2$ dans le modèle de Blume-Capel, par la méthode de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis. Le système est constitué d'un nombre total de spin $N = N_{\sigma} + N_S$, où $N_{\sigma} = 14$ atomes σ et $N_S = 32$ atomes S , comme indiqué sur la Fig. III.15. Les conditions aux limites libres sont adoptées dans ce cas.

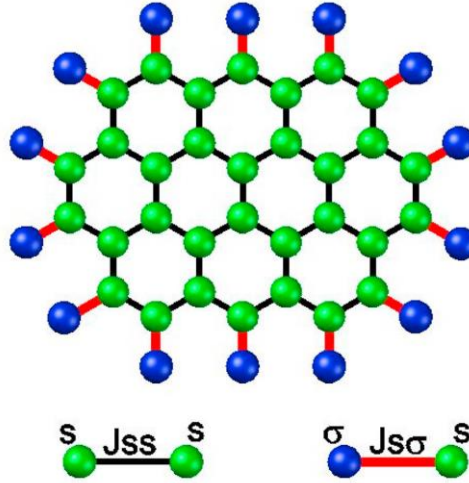


Fig. III.15 : Représentation schématique de la nano-structure d'ovalène.

L'Hamiltonien de la nano-structure ovalène étudié est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{ss} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_{s\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - H \left(\sum_i S_i + \sum_j \sigma_j \right) - D \left(\sum_i S_i^2 + \sum_j \sigma_j^2 \right) \quad (\text{III. 3})$$

où J_{ss} et $J_{s\sigma}$ sont les interactions de couplage par échange magnétique entre les atomes les plus proches voisins entre les spins S-S et S- σ , respectivement. H est le champ magnétique externe et D représente le champ cristallin.

III.3.3 Résultats et discussion

Dans cette section, nous discuterons les résultats obtenus par les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. Dans la sous-section III.3.3.1, nous étudions les diagrammes de phase à l'état fondamental. En outre, nous étudions dans la sous-section III.3.3.2 le comportement des aimantations totales en fonction de la température, du champ cristallin et du champ magnétique externe (cycle d'hystérésis).

III.3.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans cette partie, nous présentons sur la Fig. III.16, les diagrammes de phases des états fondamentaux de la nano-structure d'ovalène constitué d'un réseau hexagonal d'atomes de spin

$S=\pm 1$ (nombre d'états $=2S + 1=3$) entourés d'atomes de spin $\sigma = \pm 7/2$ (nombre d'états $=2\sigma + 1=8$), dans un modèle Blume-Capel. Un tel modèle conduit à $3 \times 8 = 24$ configurations possibles.

La Fig. III.16.a tracée dans le plan (H, D) , pour $J_{SS}=1$ et $J_{S\sigma}=-2$ montre 18 configurations stables, à savoir $(+1/2,0)$, $(+1/2,1)$, $(-1/2,1)$, $(+3/2,+1)$, $(-3/2,+1)$, $(+5/2,+1)$, $(-5/2,+1)$, $(+7/2,+1)$ et $(-7/2,+1)$ pour H positif et $(-1/2,0)$, $(-1/2,+1)$, $(+1/2,-1)$, $(-3/2,-1)$, $(+3/2,-1)$, $(-5/2,-1)$, $(+5/2,-1)$, $(-7/2,-1)$ et $(+7/2,-1)$ pour H négatif. La symétrie est parfaite par rapport à l'axe $H = 0$. Toutes les configurations stables possibles existent pour le champ cristallin négatif en raison de la compétition qui se produit entre ce champ et les différents paramètres de couplage d'échange. Un résultat semblable est trouvé dans la Réf. [174].

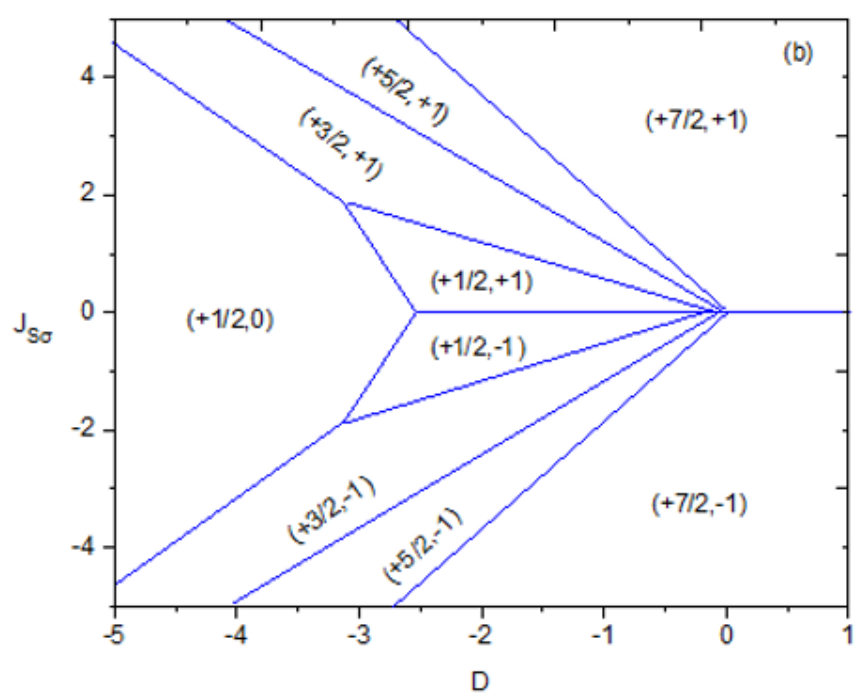
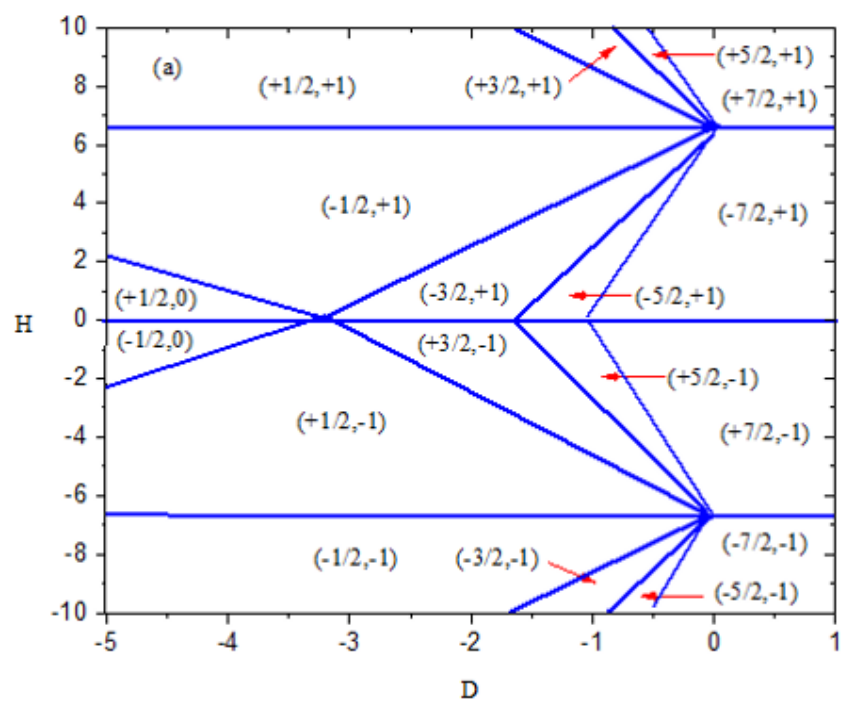
Pour explorer l'effet de l'interaction de couplage d'échange ferrimagnétique $J_{S\sigma}$, la Fig. III.16.b est établie dans le plan $(J_{S\sigma}, D)$ pour $J_{SS}=1$ et $H=0$. Cette figure présente neuf phases stables, à savoir : $(+1/2,0)$, $(+3/2,-1)$, $(+5/2,-1)$, $(+7/2,-1)$, $(+1/2,-1)$, $(+3/2,+1)$, $(+5/2,+1)$, $(+7/2,+1)$ et $(+1/2,+1)$. Nous notons que les neuf phases obtenues sont stables pour $D < 0$.

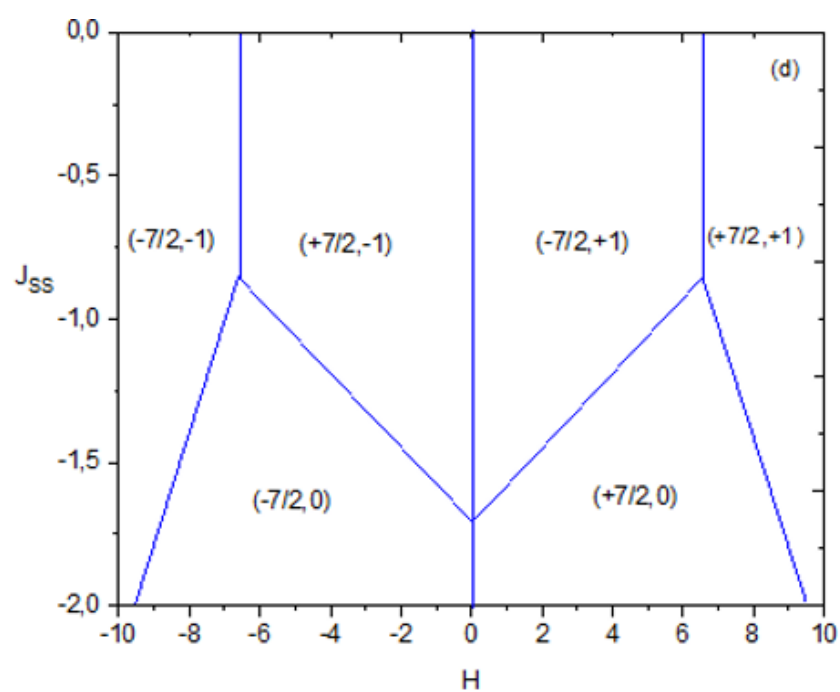
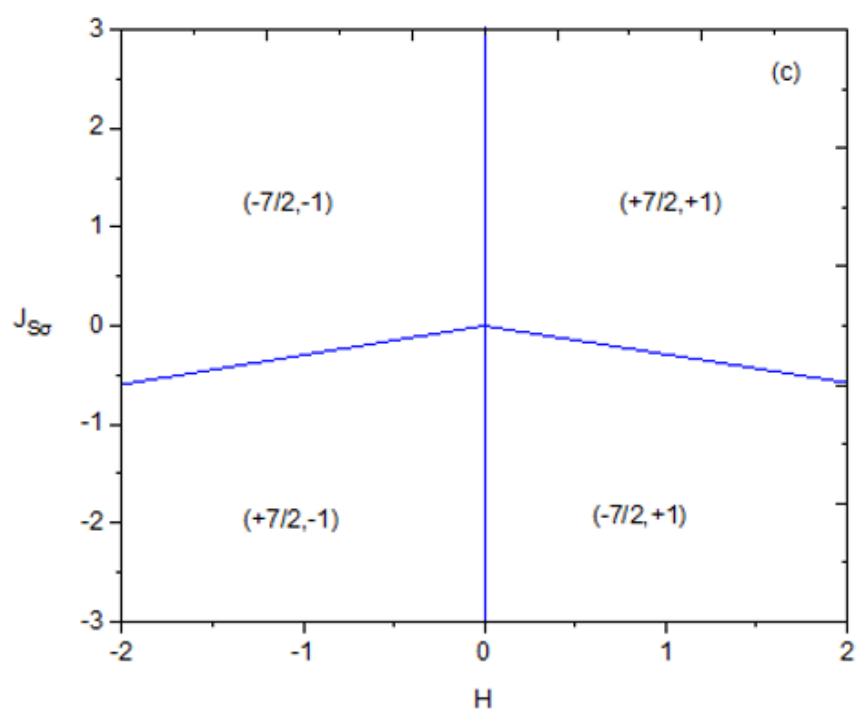
La Fig. III.16.c illustre le diagramme de phases dans le plan $(J_{S\sigma}, H)$ pour $J_{SS}=1$ et $D=0$. Nous constatons que seules quatre phases sont stables, à savoir $(-7/2,-1)$, $(-7/2,+1)$, $(+7/2,-1)$ et $(+7/2,+1)$. De telles phases correspondent aux valeurs maximales des spins. Nous notons que les phases anti-ferrimagnétiques et paramagnétiques coexistent dans le point $(J_{S\sigma}=0, H=0)$.

La Fig. III.16.d est présentée dans le plan (J_{SS}, H) pour $J_{S\sigma}=-2$ et $D=0$. Cette figure montre la présence de quatre phases stables lorsque l'interaction de couplage d'échange $J_{SS} > 0$ et six phases stables pour $J_{SS} < 0$. Ces six phases stables sont $(-7/2,-1)$, $(-7/2,0)$ et $(+7/2,-1)$ pour $H < 0$ et $(+7/2,+1)$, $(+7/2,0)$ et $(-7/2,+1)$ pour $H > 0$. La symétrie est parfaite par rapport à l'axe $H=0$.

La Fig. III.16.e est présentée dans le plan (J_{SS}, D) pour $J_{S\sigma}=-2$ et $H=0$. Cette figure ne présente que six configurations stables, à savoir : $(+1/2,-1)$, $(+3/2,-1)$, $(+5/2,-1)$, $(+7/2,-1)$, $(+7/2,0)$ et $(+1/2,0)$.

Enfin, la Fig. III.16.f est obtenue dans le plan $(J_{SS}, J_{S\sigma})$ pour $D = 0$ et $H = 0$. Cette figure montre uniquement trois configurations stables : $(-7/2,+1)$, $(-7/2,-1)$ et $(-7/2,0)$. Les phases anti-ferrimagnétiques et paramagnétiques coexistent au point $(J_{S\sigma}=0, J_{SS}=0)$.





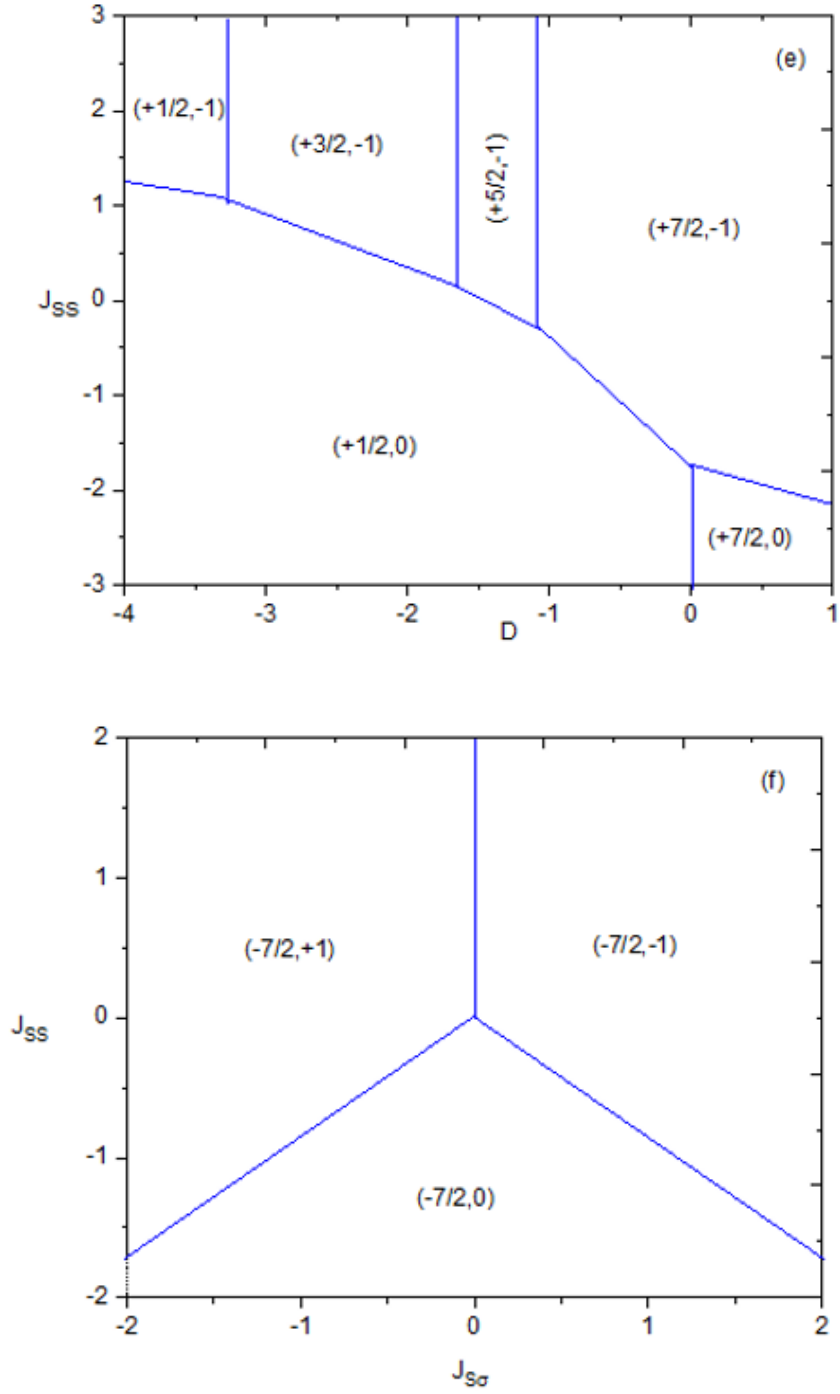


Fig. III.16 : Diagrammes de phases de l'état fondamental pour : (a) $J_{SS}=1$ et $J_{S\sigma}=-2$, (b) $J_{SS}=1$ et $H=0$, (c) $J_{SS}=1$ et $D=0$, (d) $H=0$ et $J_{S\sigma} = -2$, (e) $H=0$ et $J_{S\sigma} = -2$, (f) $D=0$ et $H=0$.

III.3.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans le présent système, nous investiguons les propriétés magnétiques de la nano-structure d'ovalène à l'aide de la simulation Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis. Les effets des interactions de couplage d'échange J_{SS} , $J_{S\sigma}$, des champs magnétiques externe et cristallin sur les

propriétés magnétiques sont discutés. En effet, la Fig. III.17 illustre le comportement thermique des aimantations partielles et totale en l'absence du champ cristallin ($D=0$) et pour les paramètres fixes $H=0.5$, $J_{SS}=1$ and $J_{S\sigma}=-0.01$. Les aimantations partielles et totale à $T \approx 0$ sont respectivement : $M_\sigma = -7/2$, $M_S = +1$ et $M_{\text{tot}} = \frac{(-7/2 \times 14) + (1 \times 32)}{(14+32)} = -0.36$. Ces valeurs sont en accord avec les valeurs de spin ($\sigma = \pm 7/2$ and $S = \pm 1$) trouvées dans les diagrammes de phase de l'état fondamental présentés en sous-section III.3.3.1. Les deux températures de compensation obtenues à la Fig. III.17 sont dues à la compétition entre les différents paramètres physiques, à savoir D , H , J_{SS} et $J_{S\sigma}$. Ces deux températures de compensation sont situées à $T_{\text{comp1}}=1.34$ et $T_{\text{comp2}}=4.16$, respectivement.

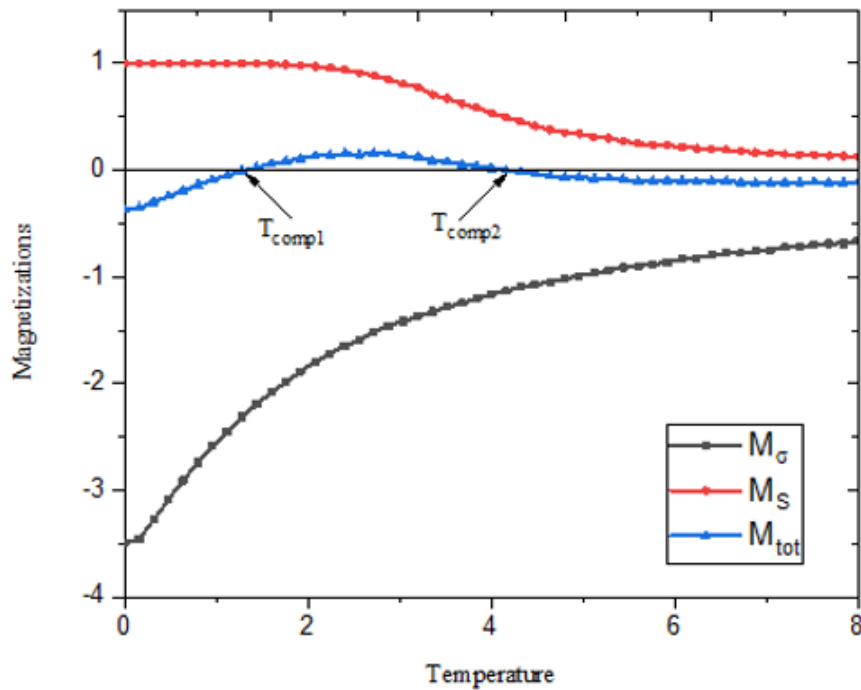
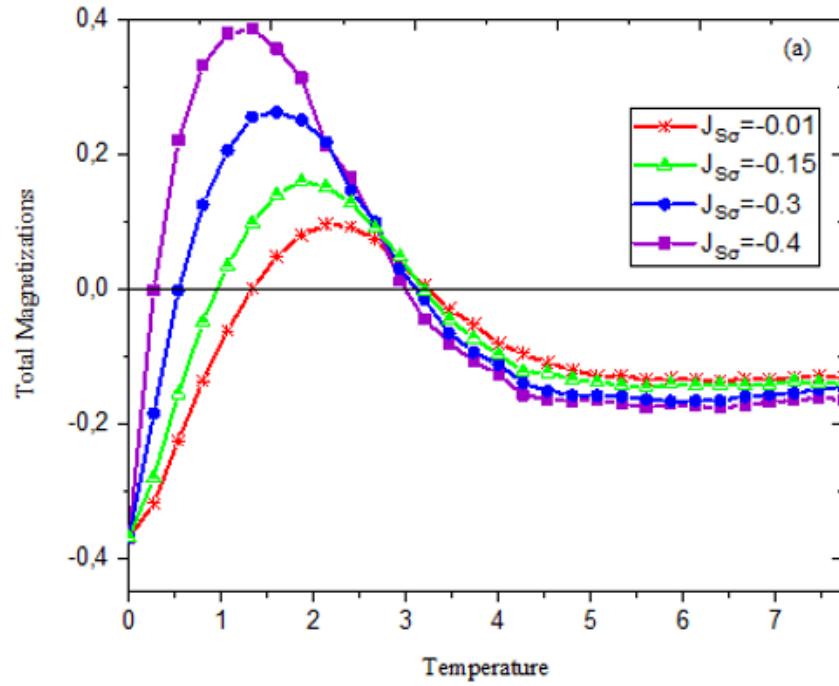


Fig. III.17 : Aimantations en fonction de la température pour $D=0$, $H=0.5$, $J_{SS}=1$ et $J_{S\sigma} = -0.01$.

Afin d'examiner l'effet du paramètre de couplage d'échange ferrimagnétique $J_{S\sigma}$ sur le comportement de la température de compensation, nous rapportons sur la Fig. III.18.a le comportement thermique des aimantations totales pour différentes valeurs de $J_{S\sigma}$. Cette figure est illustrée en l'absence de champ cristallin et pour une valeur fixe des paramètres $J_{SS} = 0.8$ et $H=0.5$. Nous pouvons voir qu'une diminution du paramètre $|J_{S\sigma}|$ donne lieu à une augmentation

des deux températures de compensation T_{comp1} et T_{comp2} . Ce résultat est contrôlé par le couplage d'échange ferrimagnétique entre spin S et σ . Collectant les résultats obtenus en Fig. III.18.a, nous présentons sur la Fig. III.18.b le comportement des températures de compensation en fonction de l'interaction de couplage d'échange $J_{S\sigma}$. Sur cette figure, nous observons clairement que l'augmentation de T_{comp1} est nette et est linéaire, alors que T_{comp2} augmente légèrement lorsque $J_{S\sigma}$ augmente. Ce résultat est dû à la concurrence induite par le choix de différents paramètres physiques dans le système.



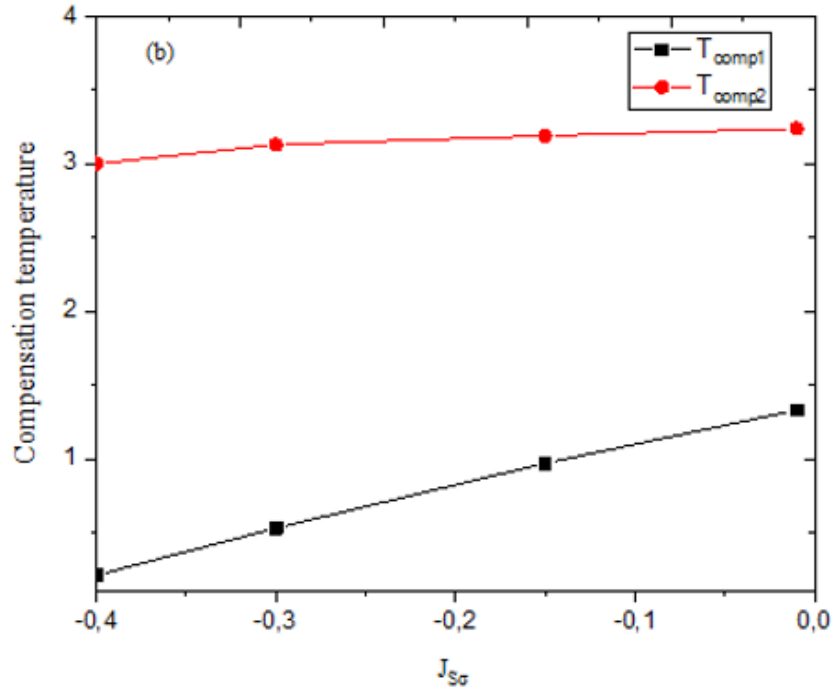


Fig. III.18 : (a) Aimantations totales en fonction de la température pour différentes valeurs de $J_{S\sigma}$. (b) Températures de compensation en fonction de $J_{S\sigma}$. Ces figures sont tracées pour $J_{SS}=0.8$, $H=0.5$ et $D=0$.

Par ailleurs, sur la Fig. III.19.a, nous illustrons le comportement thermique de l'aimantation totale en variant le paramètre J_{SS} . Cette figure est obtenue en l'absence du champ cristallin ($D=0$) et pour une valeur fixe des paramètres $J_{S\sigma}=-0.01$ et $H=0.5$. Nous remarquons que la première température de compensation T_{comp1} n'est pas affectée par la variation du paramètre J_{SS} , tandis que la deuxième température de compensation T_{comp2} augmente en augmentant le paramètre J_{SS} . En effet, la Fig. III.19.b illustre le comportement des deux températures de compensation en fonction du paramètre de couplage d'échange J_{SS} . Evidemment, T_{comp1} reste constant alors que T_{comp2} augmente presque linéairement selon J_{SS} . Ce résultat est dû au couplage d'échange ferromagnétique entre les spins S et le choix des autres paramètres physiques.

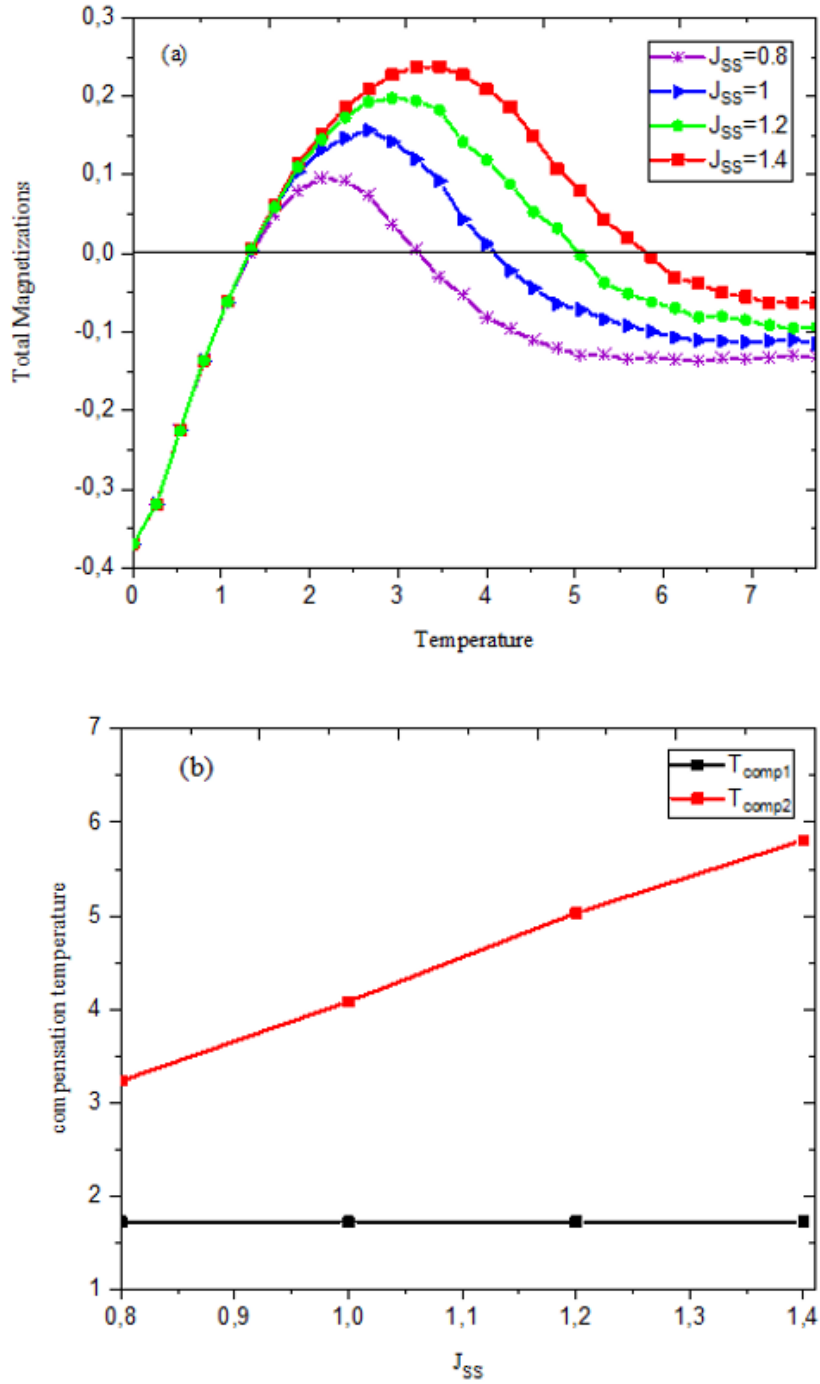


Fig. III.19 : (a) Aimantation totale en fonction de la température. (b) Températures de compensation en fonction de J_{ss} . Ces figures sont tracées pour $J_{S0}=-0.01$, $H=0.5$ et $D=0$.

Pour explorer l'effet du champ magnétique externe sur les températures de compensation, nous présentons sur la Fig. III.20 les variations thermiques des aimantations totales pour des valeurs sélectionnées de H . Cette figure est établie en l'absence du champ cristallin ($D=0$) et pour les valeurs fixes des paramètres : $J_{S0}=-0.01$ et $J_{ss}=0.8$. En effet, lors de l'augmentation des valeurs

du champ magnétique externe H , les deux températures de compensation disparaissent car le champ magnétique externe contribue au maintien de l'ordre dans le système (phase ferrimagnétique). Les résultats préliminaires confirment que pour les valeurs de champ magnétique externe supérieures au seuil $H_S \approx 0.8$, les deux températures de compensation disparaissent.

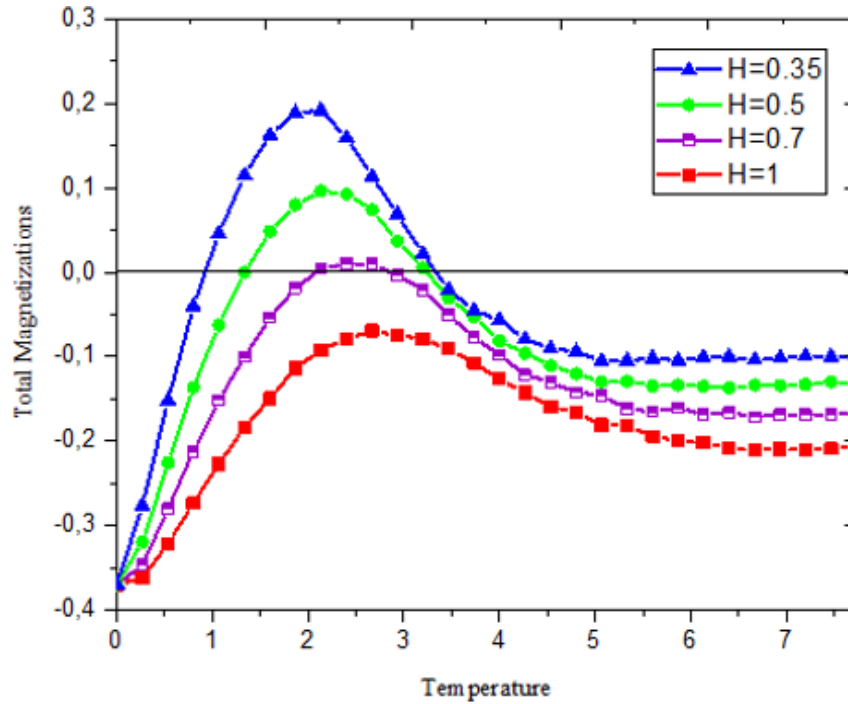
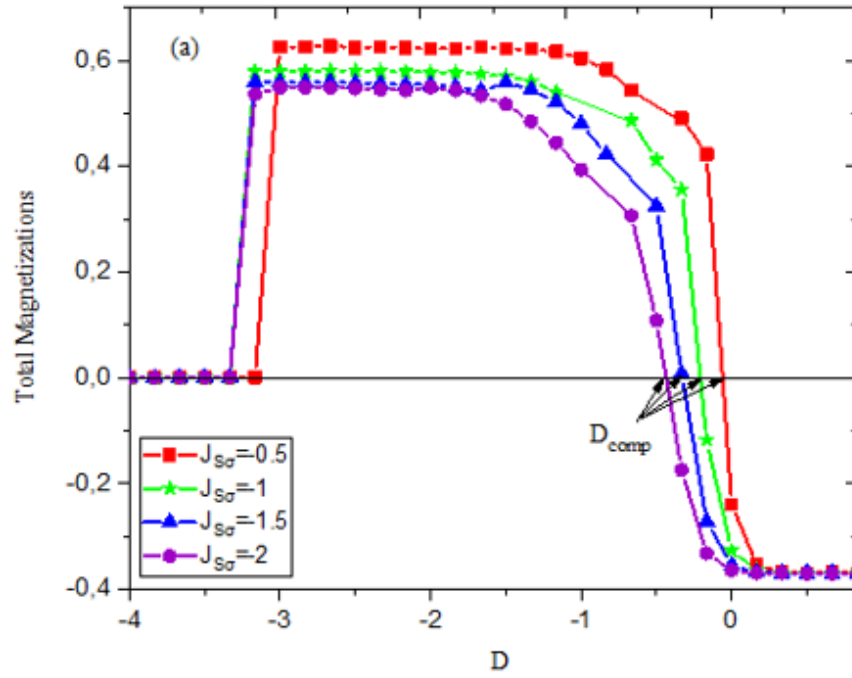


Fig. III.20 : Aimantation totale en fonction de la température : $J_{S\sigma}=-0.01$, $J_{SS}=0.8$ et $D=0$.

Pour étudier le comportement de l'aimantation en fonction du champ cristallin, la Fig. III.21.a est présentée pour plusieurs valeurs de $J_{S\sigma}$ et la valeur fixe $J_{SS}=1$. Tandis que la Fig. III.21.b est reportée pour différentes valeurs de J_{SS} et pour $J_{S\sigma}=-1$. Les Figs. III.21.a et III.21.b sont obtenus pour une température $T=0.5$ et en l'absence du champ magnétique externe ($H=0$). La Fig. III.21.a montre que, pour $D < -3.16$, le système est dans sa phase paramagnétique. Ce résultat est confirmé par le diagramme de phase à l'état fondamental. Alors que pour $D \approx -3.16$, l'aimantation subit une transition du premier ordre puis reste constante jusqu'à $D \approx -0.5$. Pour obtenir un comportement stationnaire, l'aimantation totale subit une transition du second ordre en passant par la phase super-paramagnétique localisée par D_{comp} . En effet, la compensation peut également être obtenue en faisant varier le champ cristallin. Nous avons constaté que la valeur de D_{comp} diminue en augmentant $|J_{S\sigma}|$.

D'autre part, des résultats similaires sont obtenus sur la Fig. III.21.b, sauf que dans ce cas D_{comp} ne dépend pas de J_{SS} . Tandis que le champ cristallin correspondant aux transitions du premier ordre diminue lorsque J_{SS} augmente. En effet, l'augmentation de J_{SS} maintient le système dans sa phase ferrimagnétique. Un comportement inverse est mis en évidence lors de l'inversion du rôle des paramètres de couplage d'échange $J_{\text{S}\sigma}$ et J_{SS} (voir Fig. III.21.a et III.21.b).



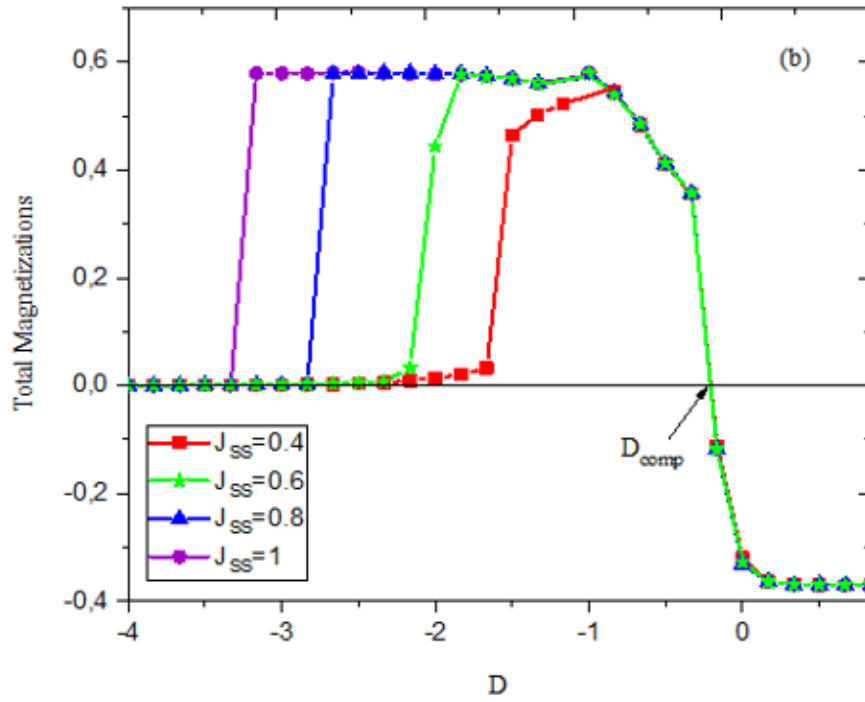
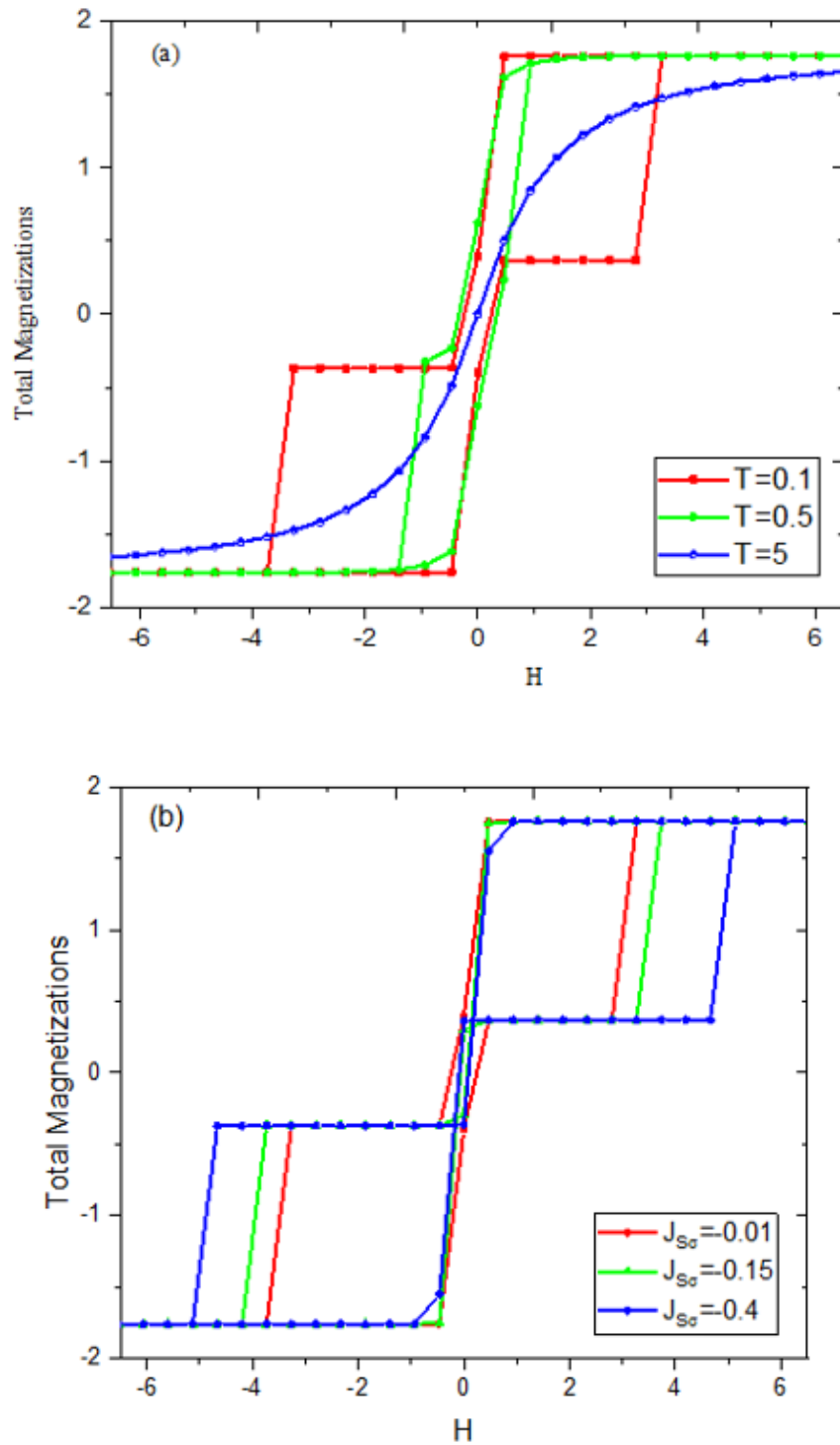


Fig. III.21: Aimantation en fonction du champ cristallin : (a) $J_{SS}=1$, $T=0.5$ et $H=0$,
(b) $J_{S\sigma}=-1$, $T=0.5$ et $H=0$.

Finalement, pour d'étudier l'effet de la température T et des couplages d'échanges $J_{S\sigma}$ et J_{SS} sur le comportement du cycle d'hystérésis, les Figures III.22.a, III.22.b et III.22.c sont respectivement établis, en l'absence de champ cristallin ($D=0$). En effet, la Fig. III.22.a est tracée pour $T=0.1$, 0.5 et 5 , pour $J_{S\sigma}=-0.01$ et $J_{SS}=1$, tandis que la Fig. III.22.b est donnée pour $J_{S\sigma}=-0.01$, -0.15 et -0.4 et pour $J_{SS}=1$. Cependant, la Fig. III.22.c est obtenue pour $J_{SS}=0.8$, 1 et 1.4 pour $J_{S\sigma}=-0.01$. Nous notons que les Fig. III.22.b et III.22.c sont établis à basse température ($T=0.1$).

La Fig. III.22.a montre qu'une augmentation de la température conduit à une diminution des surfaces des boucles qui disparaissent pour $T=5$. En fait, pour $T \geq 5$, le système est dans sa phase paramagnétique. En outre, nous déduisons de la Fig. III.22.b que l'augmentation du paramètre de couplage d'échange $|J_{S\sigma}|$ modifie la topologie des boucles. En effet, une seule boucle est obtenue pour $|J_{S\sigma}|=0.01$, alors que deux boucles apparaissent pour $|J_{S\sigma}|=0.15$ et 0.40 . Un résultat similaire a été obtenu précédemment dans la Réf. [175]. De même, le champ coercitif magnétique augmente avec l'augmentation de $|J_{S\sigma}|$.

Par ailleurs, la Fig. III.22.c montre que la surface des boucles diminue en augmentant la valeur du paramètre de couplage d'échange J_{ss} . Ceci entraîne une augmentation du champ coercitif magnétique.



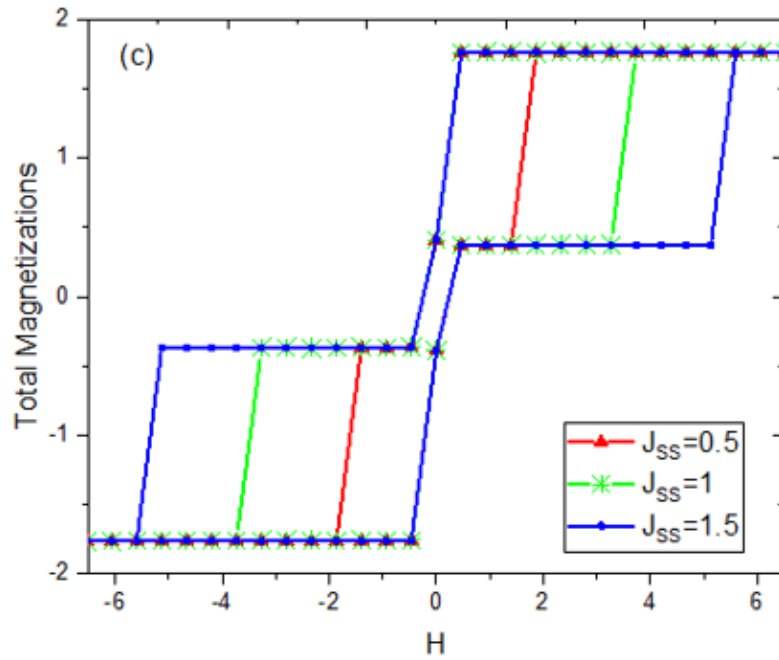


Fig. III.22 : Cycles d'hystérésis magnétique de la nano-structure ovalène pour $D=0$: (a) $J_{ss}=1$ et $J_{so}=-0.01$, (b) $J_{ss}=1$ et $T=0.1$, (c) $J_{so}=-0.01$ et $T=0.1$.

III.4 Propriétés diélectriques et comportements de compensation d'une monocouche nano-île de type naphthalène : Simulations de Monte Carlo

III.4.1 Introduction

L'une des structures intéressantes des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) est la structure naphthalène de formule $C_{10}H_8$. Le ferromagnétisme à température ambiante de la structure du naphthalène est étudié [110]. De plus, les simulations de Monte Carlo (MCS) ont souvent été utilisées pour étudier les propriétés magnétiques des nanomatériaux [128, 129, 130, 176, 177 et 178]. En effet, les systèmes à spin mixtes sont fréquemment utilisés comme modèle pour étudier le ferrimagnétisme. L'existence d'une température de compensation a été observée dans des systèmes bidimensionnels (2D) pour une combinaison différente de spin [144,146, 179-191].

En outre, les propriétés diélectriques d'une structure de nano-graphyne monocouche utilisant des simulations de Monte Carlo [192], les propriétés thermiques et diélectriques d'un nano-fil ferroélectrique à spins mixtes [193] les nanotubes ferri-électriques à double paroi [194] et l'anti-ferroélectrique / La bicouche ferroélectrique $BiFeO_3 / YMnO_3$ [195] ont été étudiés.

Dans ce travail, nous étudions une monocouche nano-île de type naphthalène, avec des spins mixtes (1, 7/2) [100, 101]. L'originalité de ce travail réside dans l'investigation des propriétés thermiques et diélectriques de cette structure à l'aide de la technique des simulations de Monte Carlo sous l'algorithme de métropole.

III.4.2 Présentation du système et de l'hamiltonien

Dans nos travaux, nous étudions les propriétés diélectriques de la monocouche nano-île de type naphthalène. Le nombre total de spins du nano-système est $N=N_\sigma+N_S = 18$ (voir Fig III.23) où $N_S=10$ et $N_\sigma=8$ et avec des spins ($S=\pm 1$, $\sigma=\pm 7/2$).

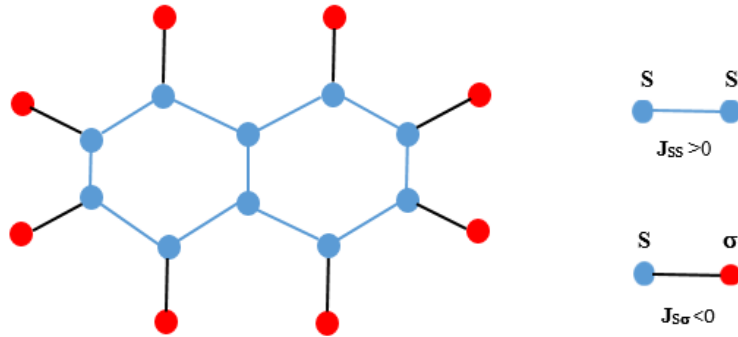


Fig. III.23 : Représentation schématique d'une monocouche nano-île de type naphthalène avec des spins S (boules bleues) et σ (boules rouges) et pour différentes interactions de couplage d'échange.

L'hamiltonien de la monocouche nano-île de type naphthalène est donné par:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^Z S_j^Z - J_{S\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} S_k^Z \sigma_l^Z - 2\mu E_Z \left(\sum_i S_i^Z + \sum_j \sigma_j^Z \right) \\ & - D_S \sum_i (S_i^Z)^2 - D_\sigma \sum_j (\sigma_j^Z)^2 \end{aligned} \quad (\text{III. 4})$$

où J_{SS} et $J_{S\sigma}$ sont respectivement les interactions de couplage d'échange électrique et ferriélectrique entre les premiers atomes voisins : $S_i^Z - S_j^Z$ et $S_k^Z - \sigma_l^Z$, respectivement.

$S_i^Z = \pm 1$ et 0, $\sigma_j^Z = \pm \frac{7}{2}, \pm \frac{5}{2}, \pm \frac{3}{2}$ et $\pm \frac{1}{2}$ sont les composantes de spin dans la direction z. Les notations $\langle i,j \rangle$ et $\langle k,l \rangle$ représentent les premiers spins proches voisins. Le paramètre μ

représente le moment dipolaire. Pour la simplicité des calculs et suivant la Réf. [193], nous prenons $\mu = 1$. E_z est le champ électrique longitudinal externe.

III.4.3 Résultats et discussion

Nous présentons dans cette section les résultats obtenus à l'aide des simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. En effet, nous explorons les diagrammes de phase des états fondamentaux dans la sous-section III.4.3.1. De plus, nous étudions dans la sous-section III.4.3.2 le comportement des polarisations et susceptibilités diélectriques en fonction de la température et des champs cristallin et électrique longitudinal externe.

III.4.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans cette sous-section, nous présentons les diagrammes de phase à l'état fondamental de la monocouche nano-île de type naphtalène dans le cadre du modèle Blume-Capel Ising [196-202], pour les spins mixtes $S=\pm 1$ et $\sigma=\pm 7/2$. Ces diagrammes de phases sont établis dans différents plans des paramètres physiques (E_z , D , J_{SS} et $J_{S\sigma}$). Le nombre d'états du spin S est $2S+1=3$ et $2\sigma+1=8$ pour le spin σ . Un tel modèle conduit à $3 \times 8 = 24$ configurations possibles.

Sur la Fig. III.24.a, nous étudions les effets des champs électriques et cristallins longitudinaux externes. Cette figure est présentée dans le plan (E_z , D) pour les paramètres de couplage d'échange fixe $J_{S\sigma}=-1$ et $J_{SS}=1$. Dans ce plan, nous avons trouvé une symétrie parfaite des configurations stables par rapport à l'axe $E_z = 0$. Nous constatons que dix-huit configurations sont stables, neuf pour $E_z < 0$: $(-7/2, -1)$; $(-7/2, +1)$; $(-5/2, -1)$; $(-5/2, +1)$; $(-3/2, -1)$; $(+3/2, -1)$; $(-1/2, -1)$; $(+1/2, -1)$ et $(-1/2, 0)$ et leurs opposées pour $E_z > 0$: $(+7/2, +1)$; $(+7/2, -1)$; $(+5/2, +1)$; $(+5/2, -1)$; $(+3/2, +1)$; $(-3/2, +1)$; $(+1/2, +1)$; $(-1/2, +1)$ et $(+1/2, 0)$.

La Fig. III.24.b illustre le diagramme de phase dans le plan (E_z , J_{SS}), en l'absence du champ cristallin ($D=0$) et pour une valeur fixe du paramètre ferri-électrique: $J_{S\sigma} = -1$. Une symétrie parfaite est toujours maintenue par rapport à l'axe $E_z=0$. Nous ne trouvons que seules six phases stables : $(-7/2, 0)$, $(-7/2, -1)$ et $(-7/2, +1)$ pour $E_z < 0$ et $(+7/2, 0)$, $(+7/2, +1)$ et $(+7/2, -1)$ pour $E_z > 0$. D'après cette figure, nous constatons que dans la région $J_{SS} < 0$, toutes les phases stables sont présentes. La phase para-électrique correspondant à $S_i^Z=0$ n'apparaît que pour $J_{SS} < 0$.

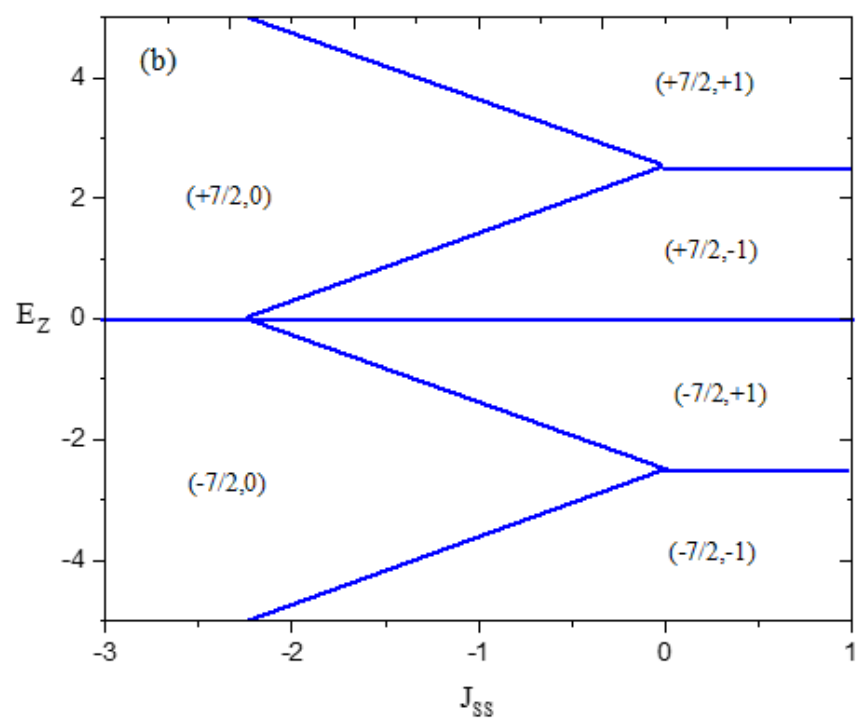
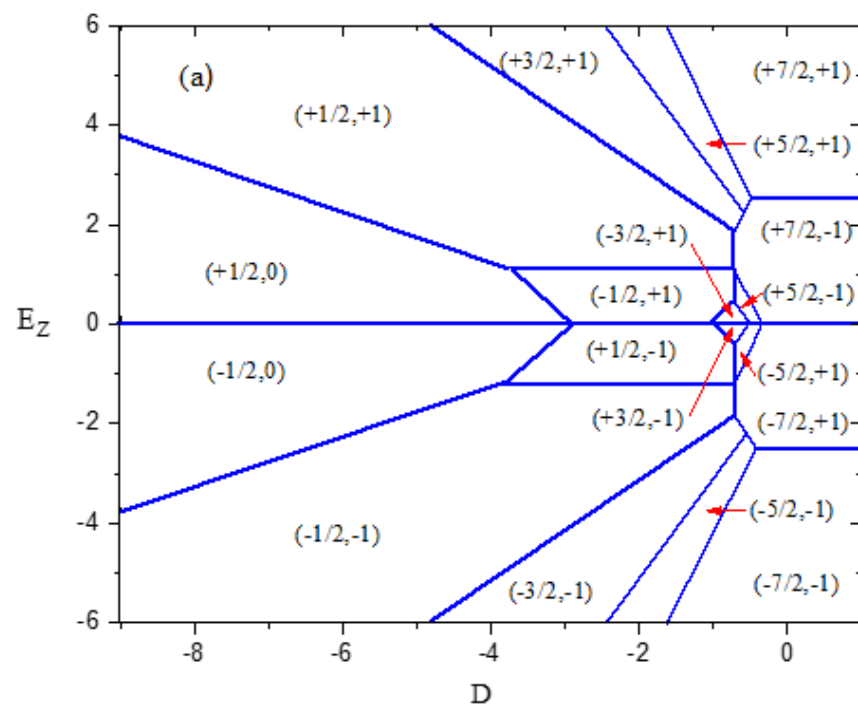
La Fig. III.24.c est présentée dans le plan (E_z , $J_{S\sigma}$). Cette figure explore les effets du champ électrique longitudinal externe, du paramètre ferri-électrique, l'absence du champ cristallin et

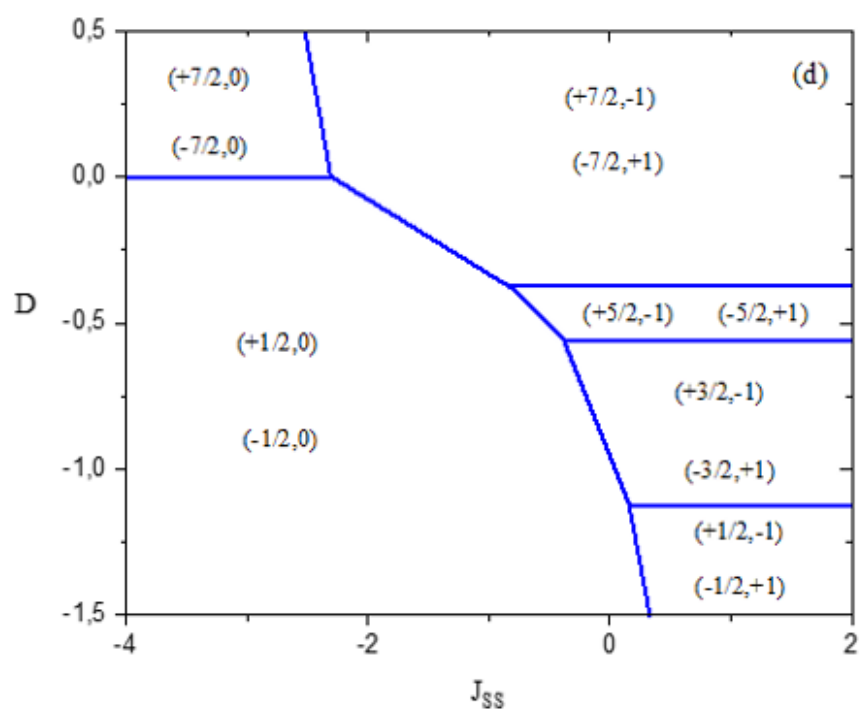
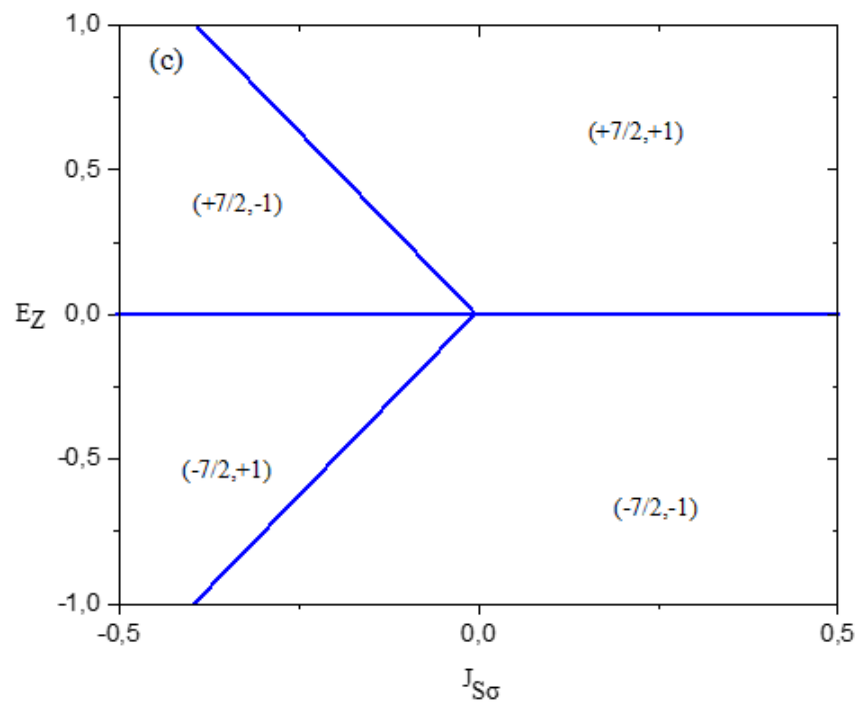
pour une valeur fixe de l'interaction de couplage d'échange : $J_{SS} = 1$. Nous n'obtenons que quatre phases stables : $(+7/2, +1)$; $(+7/2, -1)$; $(-7/2, -1)$ et $(-7/2, +1)$. À partir de cette figure, nous déduisons que les configurations stables sont celles qui correspondent aux valeurs extrêmes de spin $(\pm 7/2, \pm 1)$.

La Fig. III.24.d est tracée dans le plan (D, J_{SS}) , en l'absence de champ électrique longitudinal externe ($E_Z=0$) et pour $J_{S\sigma}=-1$. Cette figure montre que sur vingt-quatre configurations possibles, seules douze sont stables, à savoir: $(+7/2, 0)$; $(-7/2, 0)$; $(+1/2, 0)$; $(-1/2, 0)$; $(+7/2, -1)$; $(-7/2, +1)$; $(+5/2, +1)$; $(-5/2, +1)$; $(+3/2, -1)$; $(-3/2, +1)$; $(+1/2, -1)$; $(-1/2, +1)$. Nous remarquons que les phases à moments de spin minimum $(\pm 1/2, 0)$ ne sont stables que dans la région où $D < 0$ et $J_{SS} < 0$. Alors que, les phases correspondant aux moments de spin maximum $(\pm 7/2, \pm 1)$ sont stables pour $D > 0$ et $J_{SS} > 0$.

Pour explorer l'effet du paramètre ferri-électrique $J_{S\sigma}$ et du champ cristallin D sur les configurations stables, nous traçons la Fig. III.24.e dans le plan $(D, J_{S\sigma})$ pour $J_{SS}=1$ et $E_Z=0$. Cette figure montre les dix-huit phases stables déjà trouvées sur la Fig. III.24.a. D'après cette figure, nous pouvons dire que pour $D < -3.5$, les seules phases stables sont celles dont les moments de spin minimum $(\pm 1/2, 0)$. Tandis que, pour $D > 0$, les configurations stables sont celles dont les moments de spin maximum $(\pm 7/2, \pm 1)$.

Pour compléter cette étude, nous représentons sur la Fig. III.24.f les configurations stables dans le plan $(J_{SS}, J_{S\sigma})$ pour des valeurs de paramètres fixes : $D = 0$ et $E_Z = 0$. Cette figure ne présente que douze configurations stables : $(-7/2, 0)$; $(+7/2, 0)$; $(-5/2, 0)$; $(+5/2, 0)$; $(-3/2, 0)$; $(+3/2, 0)$; $(-1/2, 0)$; $(+1/2, 0)$; $(-7/2, -1)$; $(+7/2, +1)$; $(-7/2, +1)$ et $(+7/2, -1)$. À partir de cette figure, nous remarquons que pour des valeurs positives de J_{SS} , les seules phases stables sont $(\pm 7/2, \pm 1)$.





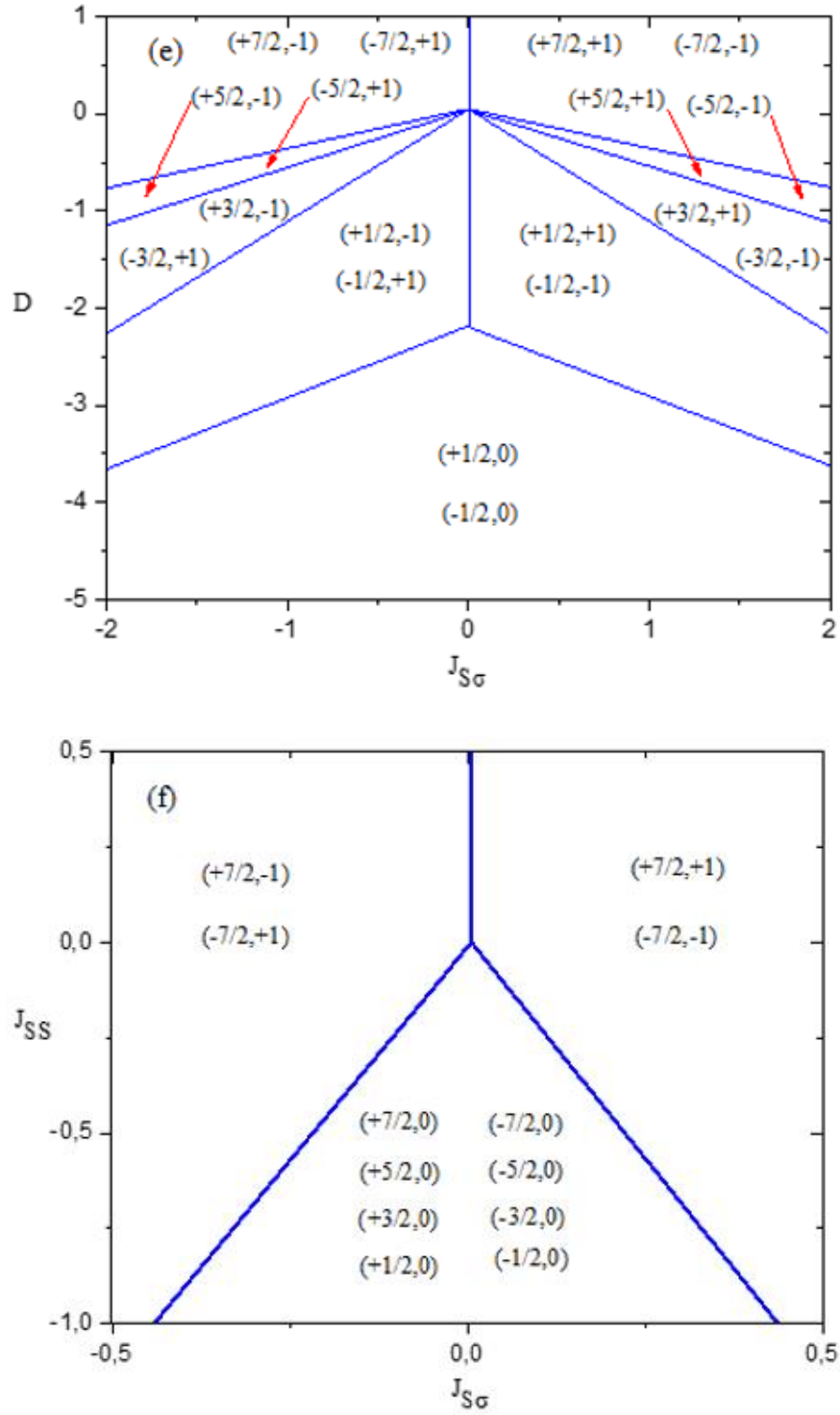
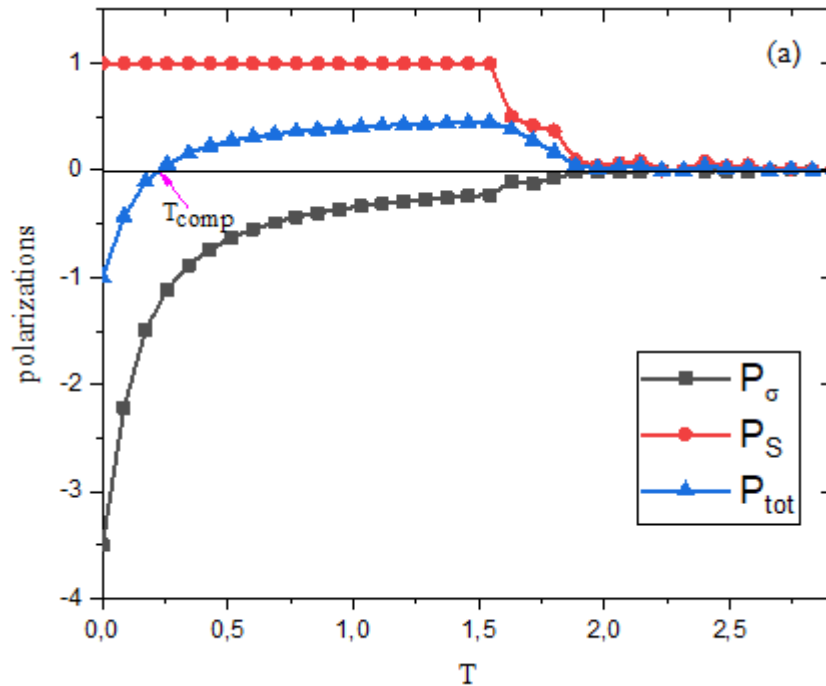


Fig. III.24: Diagrammes de phase à l'état fondamental pour : (a) $J_{SS}=1$ et $J_{S\sigma} = -1$, (b) $J_{S\sigma} = -1$ et $D=0$, (c) $J_{SS}=1$ et $D=0$, (d) $J_{S\sigma} = -1$ et $E_z=0$, (e) $J_{SS}=1$ et $E_z=0$, (f) $D=0$ et $E_z=0$.

III.4.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans la présente sous-section, nous utilisons des simulations Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis pour étudier les propriétés thermiques et diélectriques de la monocouche nano-île de type naphthalène. Sur la Fig. III.25.a, nous présentons le comportement thermique des polarisations partielles (P_S et P_σ) et totale (P_{tot}). Cette figure est obtenue en absence des deux champs $E_Z=0$ et $D=0$ et pour des valeurs d'interaction de couplage d'échange fixe : $J_{S\sigma} = -0,03$ et $J_{SS}=2$. Nous constatons que les polarisations diminuent pour une température de blocage T_B , à partir de laquelle la une polarisation est nulle. Par ailleurs, le système présente une température de compensation, qui correspond à une valeur nulle de la polarisation totale. En effet, cela est dû à la concurrence entre différents paramètres physiques $J_{S\sigma}$, J_{SS} , E_Z et D . Cette température de compensation est située à $T_{comp} \approx 0,22$. En outre, la Fig. III.25.b est tracée pour les mêmes valeurs de paramètres que ceux de la Fig. III.25.a. La Fig. III.25.b présente les comportements thermiques des susceptibilités diélectriques partielles (χ_S , χ_σ) et totale (χ_{tot}). La susceptibilité diélectrique totale présente deux pics. Le premier pic est localisé à la température de compensation T_{comp} , tandis que le second pic correspond à la température de blocage $T_B \approx 1,62$. Cette dernière valeur indique la transition entre les phases ferri-électrique ($P_{tot} \neq 0$) et para-électrique ($P_{tot} = 0$).



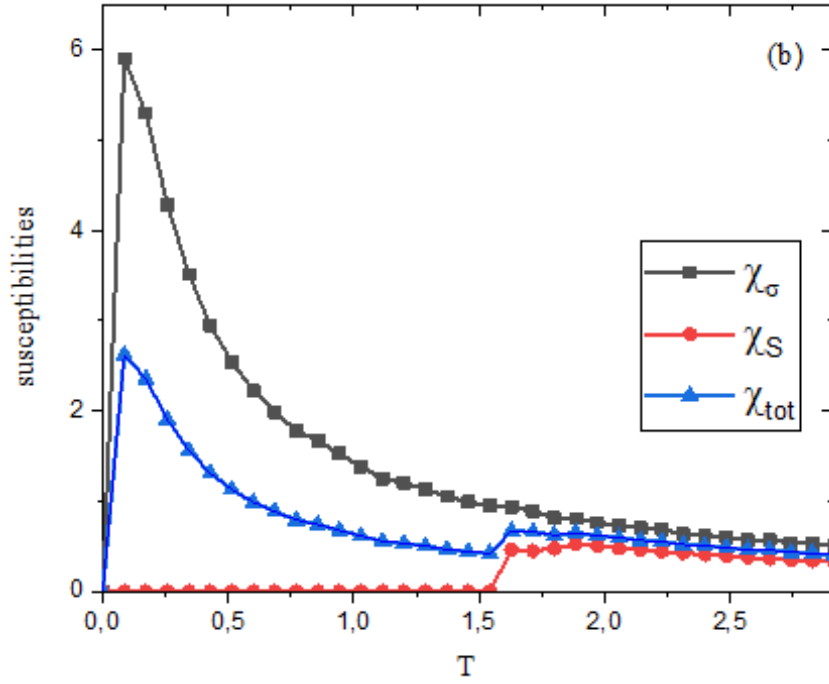


Fig. III.25: Polarisations (a) et susceptibilités (b) en fonction de la température pour des paramètres fixes : $D=0$, $E_Z=0$, $J_{SS}=2$ et $J_{S\sigma} = -0.03$.

La Fig. III.26.a illustre le comportement de la polarisation thermique totale pour différentes valeurs du coefficient ferri-électrique ($J_{S\sigma} = -0.03, -0.10$ et -0.18), pour les paramètres fixes $D=0$, $E_Z=0$ et $J_{SS}=2$. Cette figure met en évidence l'augmentation de la température de compensation quand nous augmentons en valeur absolue paramètre $J_{S\sigma}$. En outre, sur la Fig. III.26.b, nous représentons le comportement thermique de la susceptibilité diélectrique totale pour les mêmes valeurs de paramètre choisies sur la Fig. III.26.a. La susceptibilité diélectrique totale présente deux pics correspondant respectivement à la température de compensation et à la température de blocage. Cependant, le déplacement des pics de susceptibilité diélectrique vers la température plus élevée confirme le comportement des polarisations totales présentées sur la Fig. III.26.a. Les valeurs de températures de compensations obtenues, pour les cas ferri-électriques : $J_{S\sigma} = -0.03, -0.10$ et -0.18 sont respectivement $T_{\text{comp}} \approx 0.22, 0.73$ et 1.32 . De plus, les températures de blocage obtenues pour les mêmes cas ferri-électriques sont $T_B \approx 1.60$ pour $J_{S\sigma} = -0.18$ et $T_B \approx 1.73$ pour $J_{S\sigma} = -0.03$.

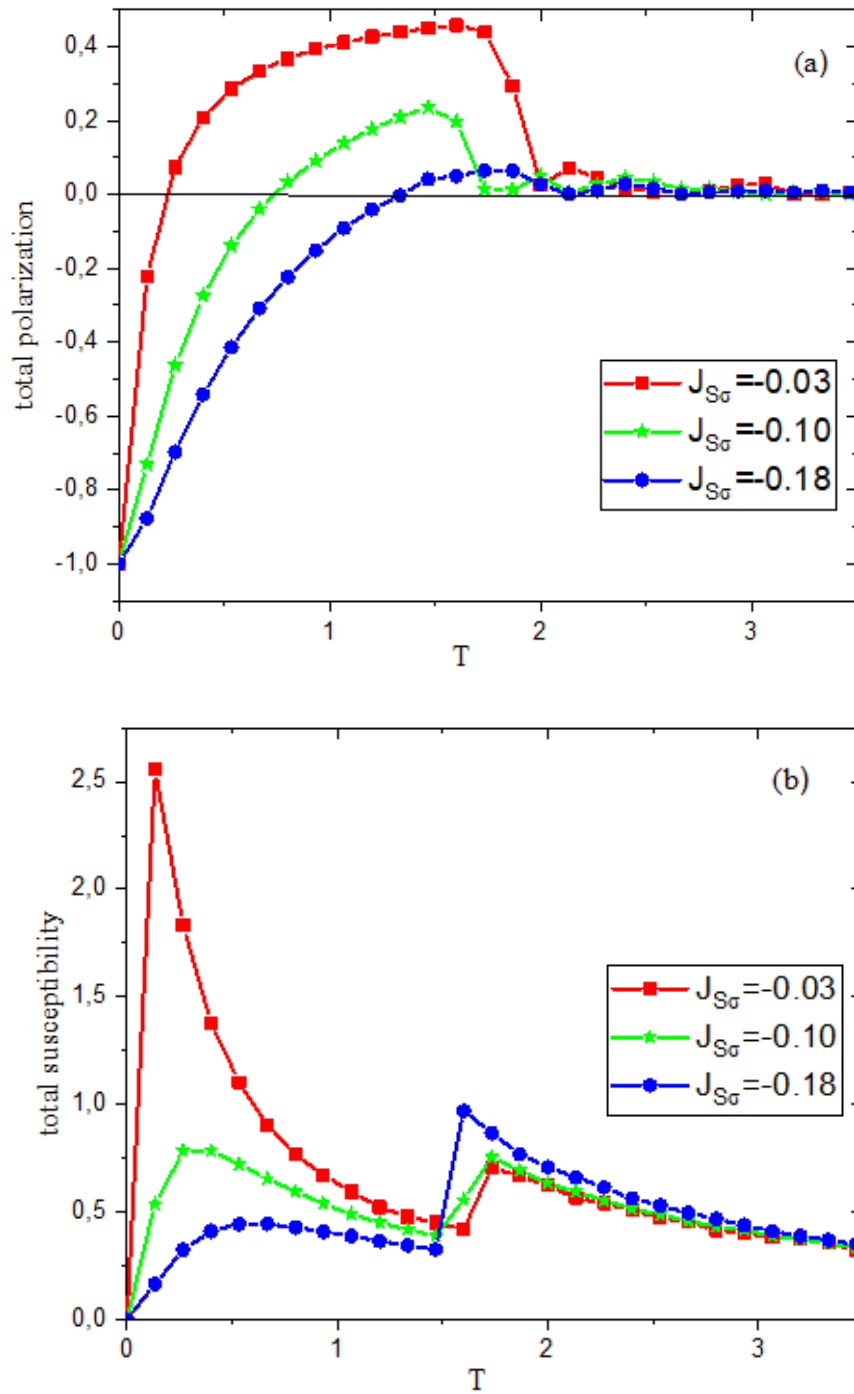
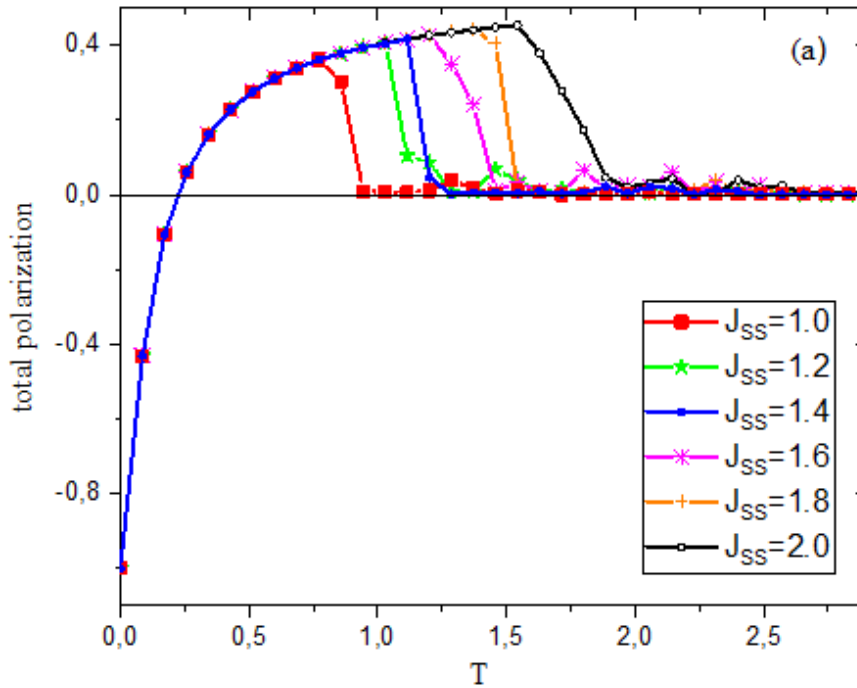
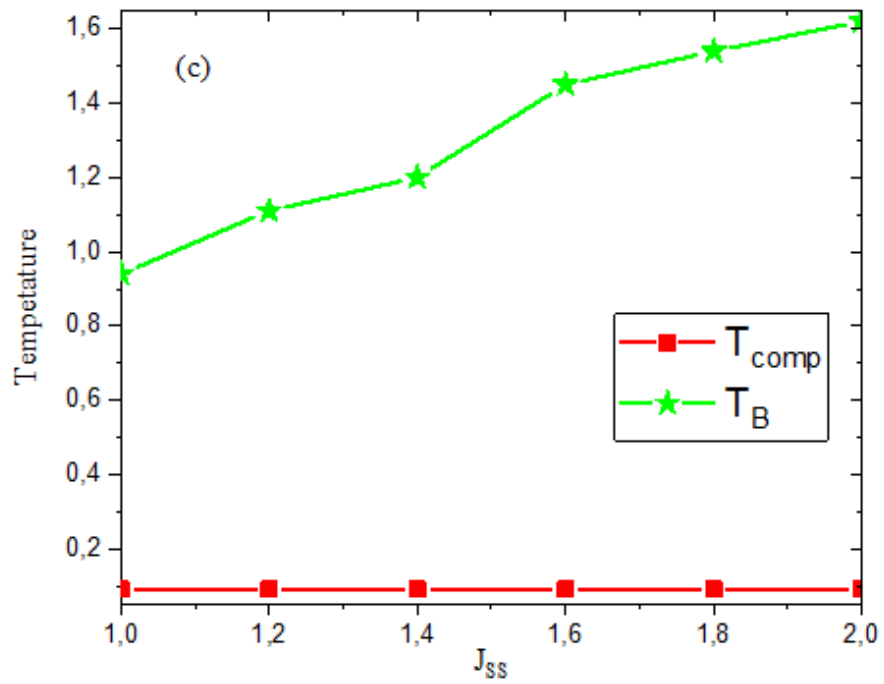
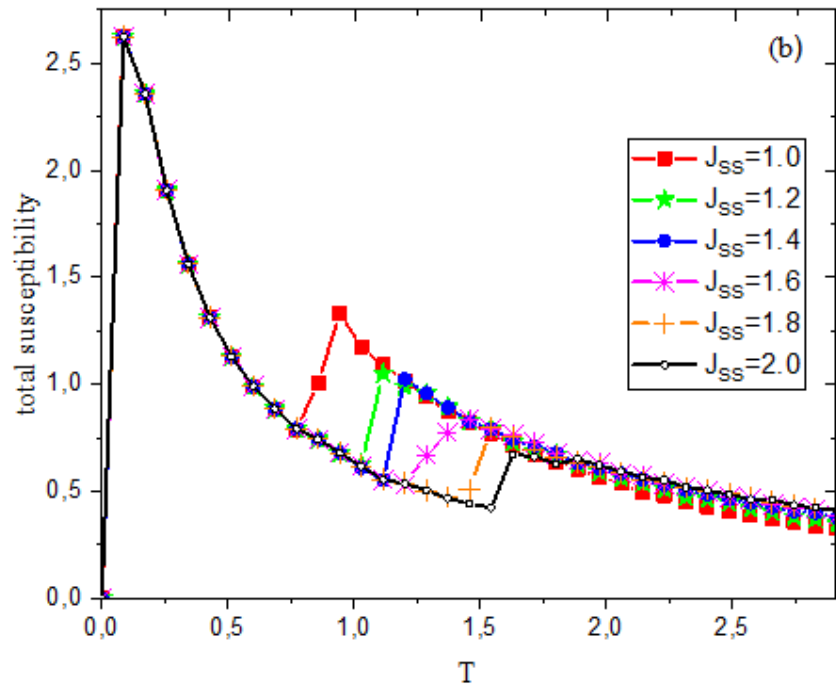


Fig. III.26 : Polarisation totale (a) et susceptibilité totale (b) en fonction de la température pour des paramètres fixes : $D=0$, $E_Z=0$ et $J_{SS}=2$.

Sur les Figs. III.27.a et III.27.b, nous étudions l'effet du paramètre de couplage d'échange J_{SS} , sur le comportement thermique des polarisations totales et des susceptibilités diélectriques totales. Ces figures sont tracées pour les valeurs sélectionnées du paramètre J_{SS} ($J_{SS}=1, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8$ et 2) et pour les valeurs fixes des paramètres : $D=0$, $E_Z=0$ et $J_{S\sigma} = -0.03$. Nous notons

que la valeur de température de compensation n'est pas affectée par la variation du paramètre J_{SS} , tandis que la valeur de température de blocage augmente lors de l'augmentation de J_{SS} . La température de compensation obtenue, pour différents paramètres de couplage d'échange J_{SS} , vaut $T_{comp} \approx 0.22$. Alors que, les températures de blocage obtenue pour les mêmes valeurs choisies du paramètre $J_{SS} = 1, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8$ et 2 sont $T_B \approx 0.95, 1.11, 1.20, 1.45, 1.54$ et 1.62 , respectivement. Pour illustrer les effets du paramètre de couplage d'interaction d'échange J_{SS} sur les températures de compensation et de blocage, nous présentons sur la Fig. III.27.c les résultats obtenus pour les mêmes paramètres physiques que sur les Figs. III.27.a et III.27.b. En effet, la température de compensation n'est pas affectée par l'augmentation du paramètre J_{SS} , alors que la température de blocage augmente lors de l'augmentation du paramètre J_{SS} .





Figs. III.27: (a) Polarisation totale, (b) susceptibilité totale en fonction de la température pour des paramètres fixes : $D=0$, $E_Z=0$ et $J_{S\sigma}=-0.03$ et (c) températures de compensation et de blocage en fonction du paramètre J_{SS} .

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'étude du comportement de la polarisation totale par rapport au champ cristallin. En fait, la Fig. III.28 est présentée pour plusieurs valeurs de paramètres ferri-électriques ($J_{S\sigma} = -0.10, -0.30$ et -0.50) et des valeurs de paramètres fixes : $J_{SS}=2$, $T=0.1$ et $E_z=0$. À partir de cette figure, trois régions différentes sont à distinguer, à savoir : la région (i) : $D < -1.75$, la région (ii): $-1.75 < D < 0.10$ et la région (iii): $D > 0.10$. Dans la première région, indépendamment des valeurs des paramètres ferri-électriques ($J_{S\sigma}$), le système est dans sa phase para-électrique. Dans la deuxième région, les polarisations totales subissent une transition du premier ordre pour différentes valeurs du paramètre ferri-électrique. Enfin, dans la troisième région, les polarisations totales diminuent subissant une transition du second ordre et convergent vers la valeur de saturation de la polarisation totale $P_{\text{sat}} = -1$ ($P_{\text{tot}} = \frac{10 \times 1 - 8 \times 3.5}{10 + 8}$). Cette valeur est en bon accord avec le diagramme de phase de l'état fondamental (voir par exemple la Fig. III.24.f).

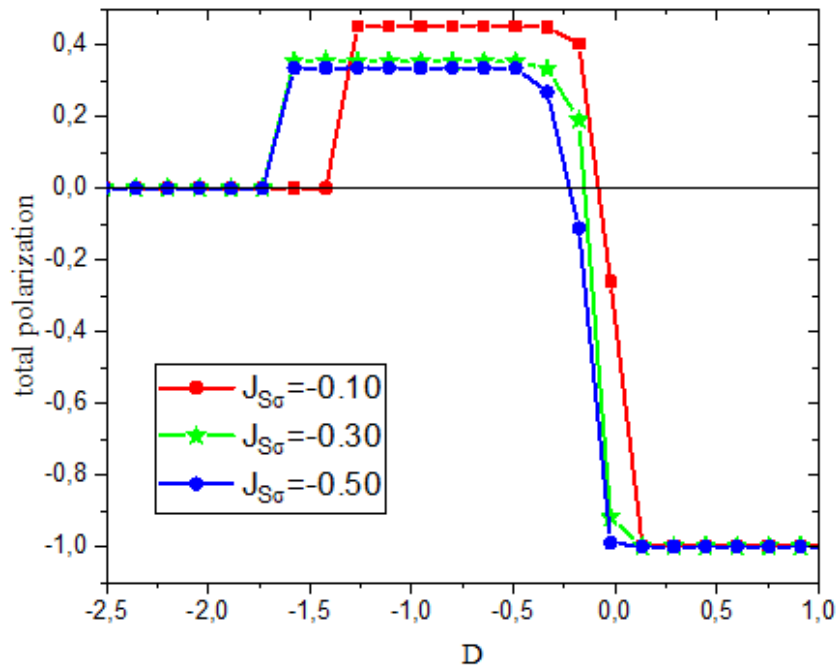
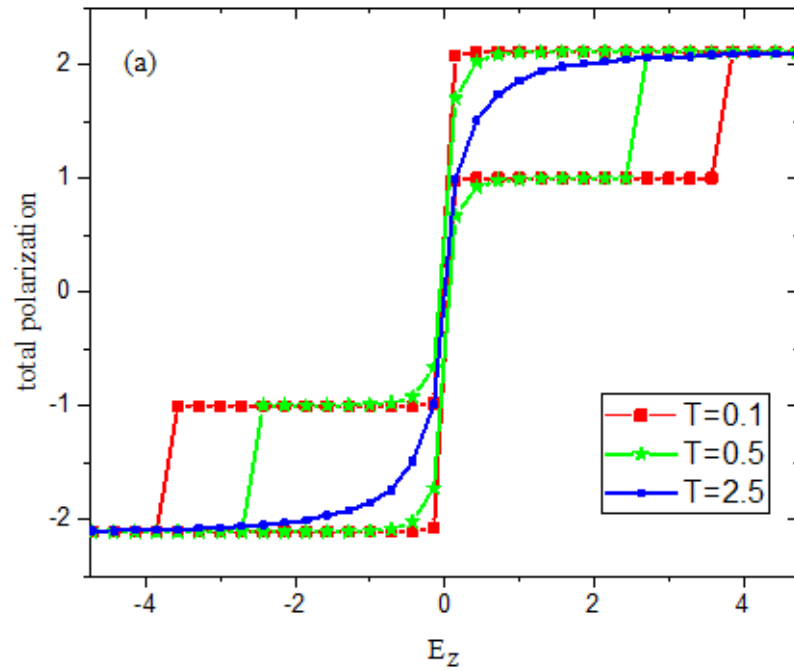


Fig. III.28: Polarisation totales en fonction du champ cristallin pour $T=0.1$, $E_z=0$ et $J_{SS}=2$.

Pour compléter cette étude, nous présentons sur les Figs. III.29 (a-c) les cycles d'hystérésis de la monocouche nano-île de type naphthalène en l'absence du champ cristallin. La Fig. III.29.a est tracée pour différentes températures : $T=0.1, 0.5$ et 2.5 et pour $J_{S\sigma} = -0.03$ et $J_{SS}=2$. Sur cette figure, nous remarquons que l'augmentation de l'effet de température consiste à diminuer la

surface des boucles. De plus, l'augmentation de la température a pour but de permettre le retard de la polarisation de saturation. Le comportement para-électrique est observé pour $T \geq 2.5$. En outre, la Fig. III.29.b est tracée pour plusieurs valeurs de paramètres ferri-électriques : $J_{S\sigma} = -0.03, -0.10$ et -0.40 et pour $J_{SS}=2$ et $T=0.1$. Nous constatons que l'augmentation en valeur absolue du paramètre $|J_{S\sigma}|$ fait croître le champ électrique coercitif qui conduit à une augmentation de la surface des boucles. La présence des boucles est due au comportement ferri-électrique du système étudié ($J_{S\sigma} < 0$). Enfin, la Fig. III.29.c est tracée pour différentes valeurs du paramètre de couplage d'échange $J_{SS}=1, 1.6$ et 2 , pour une température $T=0.1$ et pour $J_{S\sigma} = -0.03$. Cette figure montre que la surface de boucle augmente lorsque la valeur du paramètre J_{SS} augmente.



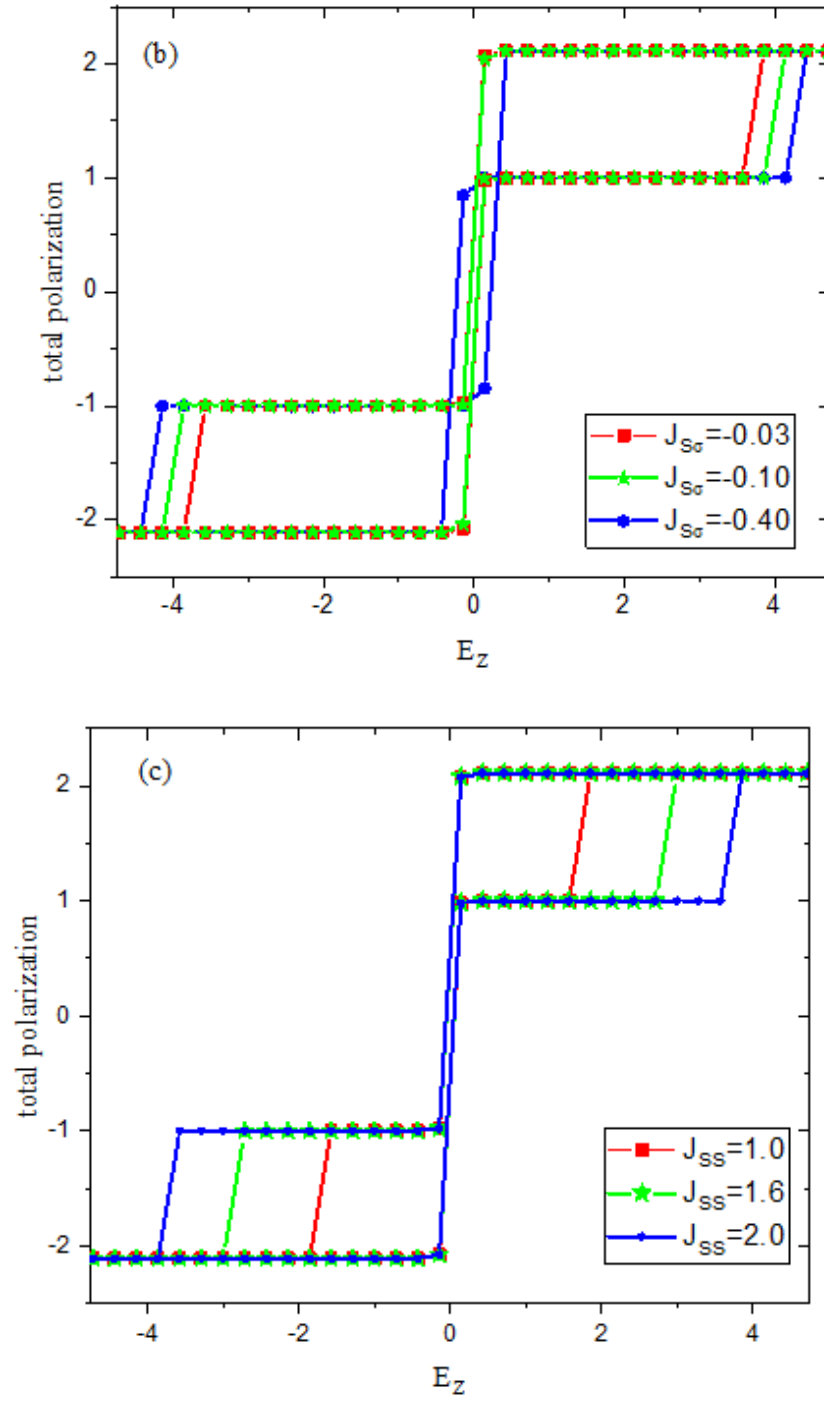


Fig. III.29: Cycles d'hystérésis du nanowire de type naphthalène monocouche pour $D=0$: (a) : $J_{ss}=-0.03$ et $J_{ss}=2$, (b) : $J_{ss}=2$ et $T=0.1$ et (c) : $J_{ss}=-0.03$ et $T=0.1$.

III.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés magnétiques des structures de graphène à trois couches avec des plans non équivalents ABA et BAB, cœur-coquille de borophene, d'ovalene et de naphthalène. Premièrement, les diagrammes de phase de l'état fondamental ont été établis dans plusieurs plans pour les différents systèmes étudiés. Dans le cas des températures non nulles, nous avons appliqué les simulations de Monte Carlo afin d'étudier le comportement thermique, l'effet des interactions de couplage d'échange et du champ magnétique extérieur et cristallin. Les deux systèmes de graphyne ABA et BAB présentent la température de compensation dans le cas pur. On constate également que cette température de compensation augmente lorsqu'on diminue la probabilité de dilution pour le système ABA. Pour le système BAB, l'effet de dilution est inversé. Par ailleurs, l'augmentation de la concentration de dilution P' dans la structure cœur-coquille de borophene entraîne une diminution de la température de compensation réduite. Pour des paramètres spéciaux, l'évolution de l'aimantation et la polarisation totale des nanostructures d'ovalene et de naphthalène conduit à l'apparition des températures de compensation. Ces températures de compensation dépendent du choix des paramètres de couplage d'interaction d'échange. Enfin, nous avons étudiés les cycles d'hystérésis magnétiques pour les structures de borophene d'ovalene et de naphthalène. Nous avons trouvé que les surfaces des boucles des cycles d'hystérésis magnétiques et diélectriques diminuent en augmentant la concentration de dilution, de température et du paramètre de couplage ferrimagnétique et ferri-électrique.

CHAPITRE IV : Le comportement de la température de transition dans les structures de graphyne monocouche et bicouche et dans la structure de coronene monocouche

IV.1 : Comportements de l'aimantation et de la susceptibilité dans une structure de graphyne bicouche : Simulations Monte Carlo

IV.1.1 Introduction

Depuis 2004, les structures graphènes fascinent les physiciens pour leurs propriétés remarquables [203]. Leurs feuilles de carbone constituées d'une seule couche d'atomes ont une structure en nid d'abeille et leurs caractéristiques électroniques et mécaniques très particulières font d'elles un matériau de futur. De nombreux chercheurs ont montré que d'autres structures de carbone – dites de graphynes - pourraient être encore plus intéressantes [204-207]. Le Graphyne, une structure bidimensionnelle de type carbone, est également une couche de carbone juste en épaisseur d'atome [208]. En outre, le graphyne a des liaisons doubles et triples et n'a pas toujours une symétrie hexagonale. Il existe de nombreuses structures de graphyne à double et triple liaison, mais des arrangements légèrement distincts [209]. En effet, différents types de graphyne sont suggérés en insérant des liaisons triples carbone (-CC-) dans les liaisons graphène C-C, dont trois formes extrêmement symétriques α -, β - et π -graphyne [210-212]. De plus, les structures graphyne ont les mêmes caractéristiques exceptionnelles que le graphène, telles que la mobilité élevée des porteurs, des caractéristiques mécaniques puissantes et des caractéristiques chimiques et thermiques exceptionnelles [213-215]. Des modèles scientifiques ont montré que les électrons conducteurs du graphyne se déplacent très rapidement, comme ils le font dans le graphène, mais dans une seule direction [216, 217]. De plus, la liaison avec d'autres métaux de transition peut donner un semi-conducteur à espace étroit ou polarisé en spin. Bien que l'utilisation du graphyne ne soit pas encore répandue, ses caractéristiques sont encourageantes pour un certain nombre d'utilisations y compris les nano-chargeurs, les transistors et les capteurs [218, 219].

Dans ce travail, nous étudions un système constitué d'une structure de graphyne magnétique à deux couches, avec des spins demi-entiers $\sigma=\pm 7/2$ et entier $S=\pm 1$. À notre connaissance, dans la littérature aucune étude n'a été faite sur la structure du graphyne bicouche se basant sur les simulations de Monte Carlo. Notre travail consiste à étudier les diagrammes de phase à l'état fondamental de la structure graphyne bicouche dans différents plans de paramètres physiques. De plus, nous illustrons le comportement thermique de l'aimantation et de la susceptibilité du système considéré ainsi que la dépendance de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin. Pour compléter cette étude, les cycles d'hystérésis de la structure graphyne bicouche sont élaborés.

IV.1.2 Présentation du nano-système et de l'hamiltonien correspondant

La structure du graphyne bicouche est étudiée avec des conditions aux limites libres. Le système est composé de deux plans magnétiques, avec des spins $\sigma=\pm 7/2$ (dans le plan A) et $S=\pm 1$ (dans le plan B). Le nombre total d'atomes du système est $N=N_\sigma+N_S=216$ (voir Fig. IV.1).

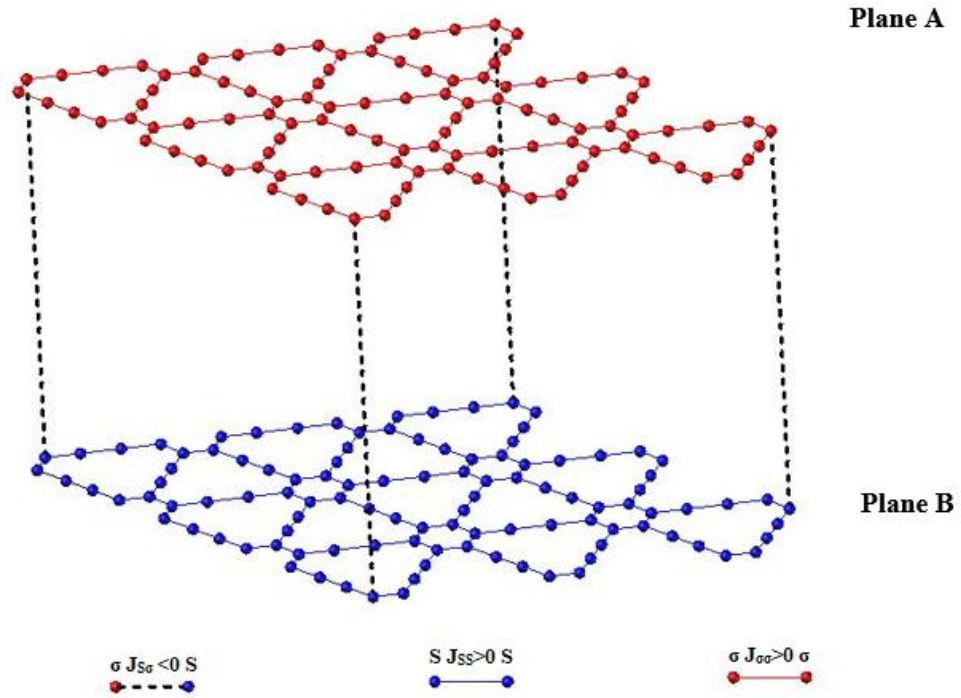


Fig. IV.1: Représentation schématique de deux plans de graphyne.

L'hamiltonien de la structure graphyne bicouche est donné par :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_{S\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - H \left(\sum_i S_i + \sum_j \sigma_j \right) \\ & - D_S \sum_i S_i^2 - D_\sigma \sum_j \sigma_j^2 \end{aligned} \quad (\text{IV. 1})$$

où J_{SS} , $J_{\sigma\sigma}$ et $J_{S\sigma}$ sont les interactions de couplage d'échange entre deux premiers atomes voisins avec de type (S-S), (σ - σ) et (σ -S), respectivement. H est le champ magnétique externe et D est le champ cristallin. En effet, les champs cristallins D_σ et D_S agissent respectivement sur les spins S et σ . Dans la suite de ce travail, nous limiterons cette étude pour $D = D_\sigma = D_S$. Pour simplifier encore d'avantage nos calculs, nous utilisons les paramètres réduits comme suit : $R_1 = J_{SS}/J_{\sigma\sigma}$, $R_2 = J_{S\sigma}/J_{\sigma\sigma}$, $h = H/J_{\sigma\sigma}$, $d = D/J_{\sigma\sigma}$ et la température réduite $t = T/J_{\sigma\sigma}$.

IV.1.3 Résultats et discussions

Nous allons discuter dans cette section les résultats obtenus en utilisant les simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. Dans les sous-sections ci-dessous, nous étudierons les diagrammes de phase à l'état fondamental ($t=0$). Puis pour des températures non nulles ($t \neq 0$), nous examinons le comportement de l'aimantation et de la susceptibilité en fonction de la température, du champ cristallin et du champ magnétique externe.

IV.1.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans cette sous-section, nous présentons sur les Figs. IV.2, les diagrammes de phase de l'état fondamental de la structure de graphyne bicouche dans le modèle de Blume-Capel avec des spins $S = \pm 1$ (nombre d'états $= 2S + 1 = 3$) et $\sigma = \pm 7/2$ (nombre d'états $= 2\sigma + 1 = 8$). Ce modèle conduit à $3 \times 8 = 24$ configurations possibles.

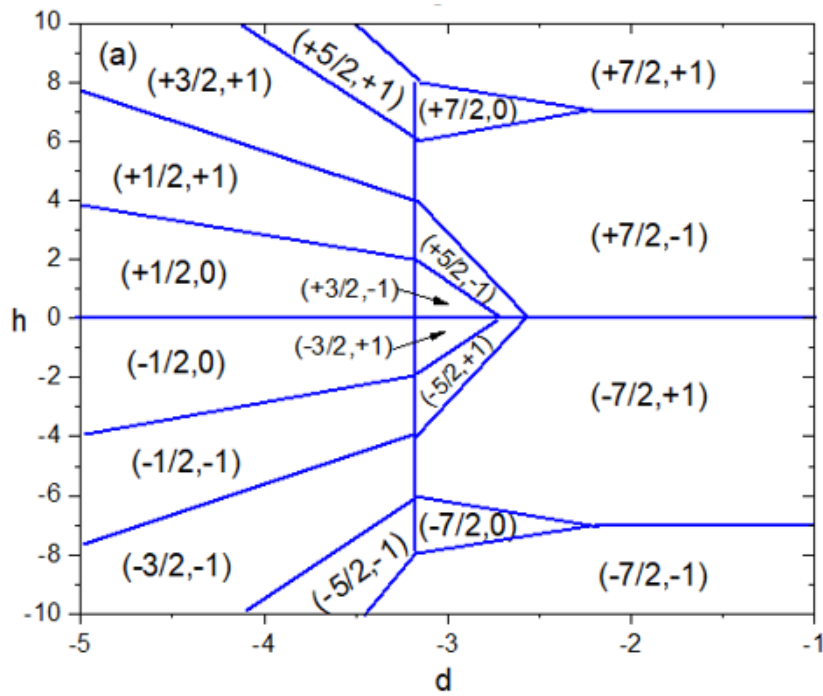
Pour étudier l'effet du champ cristallin et du champ magnétique externe, nous présentons la Fig. IV.2.a dans le plan (d , h), pour des valeurs fixes des paramètres réduits $R_1 = 1$ et $R_2 = -1$. Dans ce plan, nous avons trouvé dix-huit configurations stables, à savoir: $(+7/2, +1)$; $(+7/2, 0)$; $(+5/2, +1)$; $(+3/2, +1)$; $(+1/2, +1)$; $(+1/2, 0)$; $(+5/2, -1)$; $(+7/2, -1)$; et $(+3/2, -1)$ pour $h > 0$ et $(-7/2, -1)$; $(-7/2, 0)$; $(-5/2, -1)$; $(-3/2, -1)$; $(-1/2, -1)$; $(-1/2, 0)$; $(-5/2, +1)$; $(-7/2, +1)$; et $(-3/2, +1)$ pour $h < 0$. Cette figure fournit une symétrie parfaite des configurations par rapport à l'axe $h=0$.

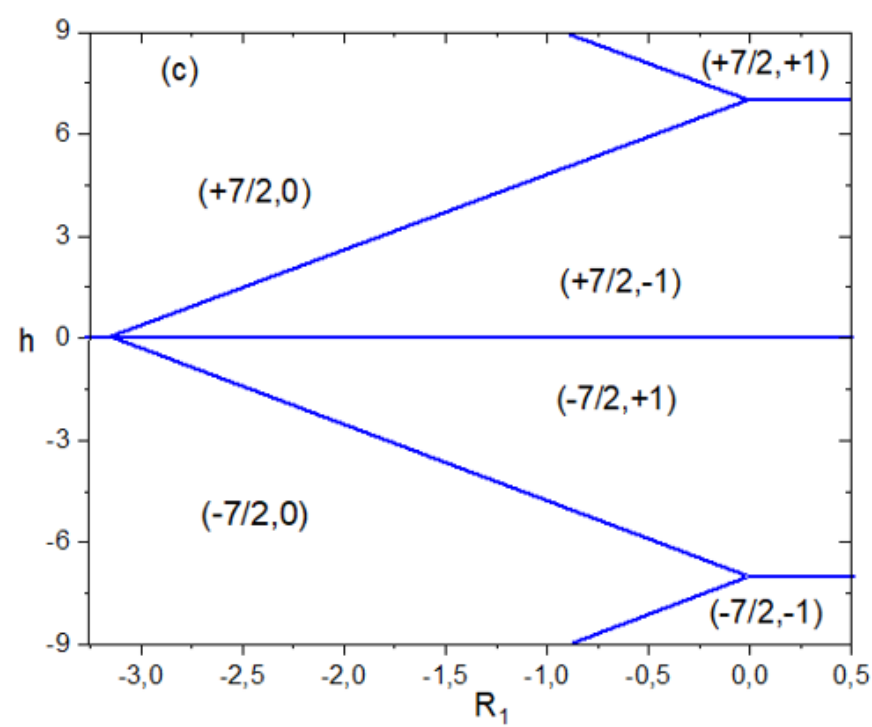
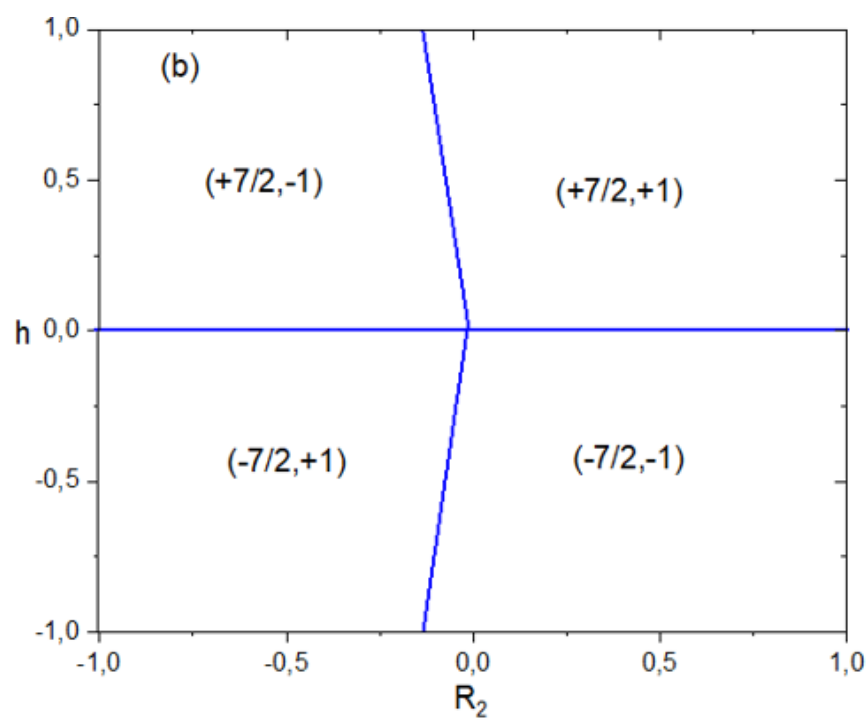
Sur la Fig. IV.2.b, nous présentons les diagrammes de phase de l'état fondamental du système étudié dans le plan (R_2 , h), en l'absence du champ cristallin ($d=0$) et pour le paramètre $R_1 = 1$. Dans ce plan, nous n'avons que quatre configurations stables, à savoir : $(+7/2, -1)$; $(+7/2, +1)$; $(-7/2, +1)$ et $(-7/2, -1)$. Nous pouvons noter que ces configurations correspondent aux moments de spin maximum ($S = \pm 1$ et $\sigma = \pm 7/2$). Il est clair que les quatre phases magnétiques coexistent au point ($R_2=0$, $h=0$).

De plus, la Fig. IV.2.c est tracée dans le plan (R_1, h) , pour des paramètres réduits fixes $d = 0$ et $R_2 = -1$. Dans ce plan, en des configurations stables obtenues dans le plan (R_2, h) s'ajoutent deux autres configurations qui sont $(+7/2, 0)$ et $(-7/2, 0)$.

La Fig. IV.2.d illustre les diagrammes de phase à l'état fondamental dans le plan (R_2, d) pour les paramètres réduits fixes $h = 0$ et $R_1 = 1$. Dans ce plan, il y a quatorze configurations stables à savoir: $(+7/2, -1)$; $(-7/2, +1)$; $(+5/2, -1)$; $(-5/2, +1)$; $(+3/2, -1)$; $(-3/2, +1)$; $(+1/2, -1)$; $(-1/2, +1)$; $(+7/2, 0)$; $(-7/2, 0)$; $(+5/2, 0)$; $(-5/2, 0)$; $(+3/2, 0)$; $(-3/2, 0)$.

Dans la Fig. IV.2.e, nous traçons les résultats obtenus dans le plan (R_1, d) , en l'absence du champ magnétique externe réduit ($h=0$) et pour un paramètre réduit fixe $R_2=-1$. Sur cette figure, nous n'avons que douze configurations stables qui sont: $(-7/2, +1)$; $(+7/2, -1)$; $(+5/2, -1)$; $(-5/2, +1)$; $(+3/2, -1)$; $(-3/2, +1)$; $(+1/2, -1)$; $(-1/2, +1)$; $(+1/2, 0)$; $(-1/2, 0)$; $(+7/2, 0)$ et $(-7/2, 0)$.





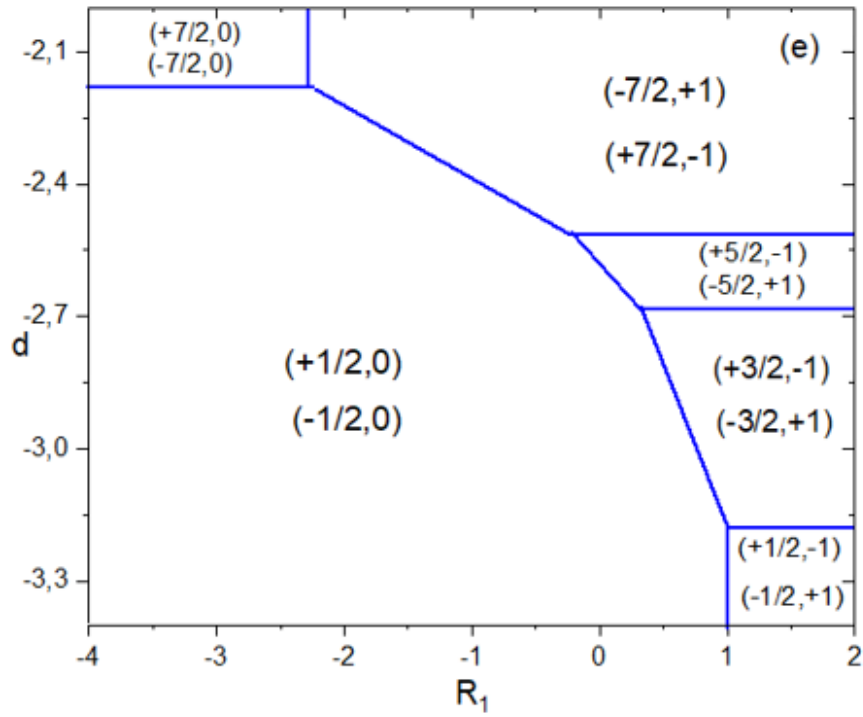
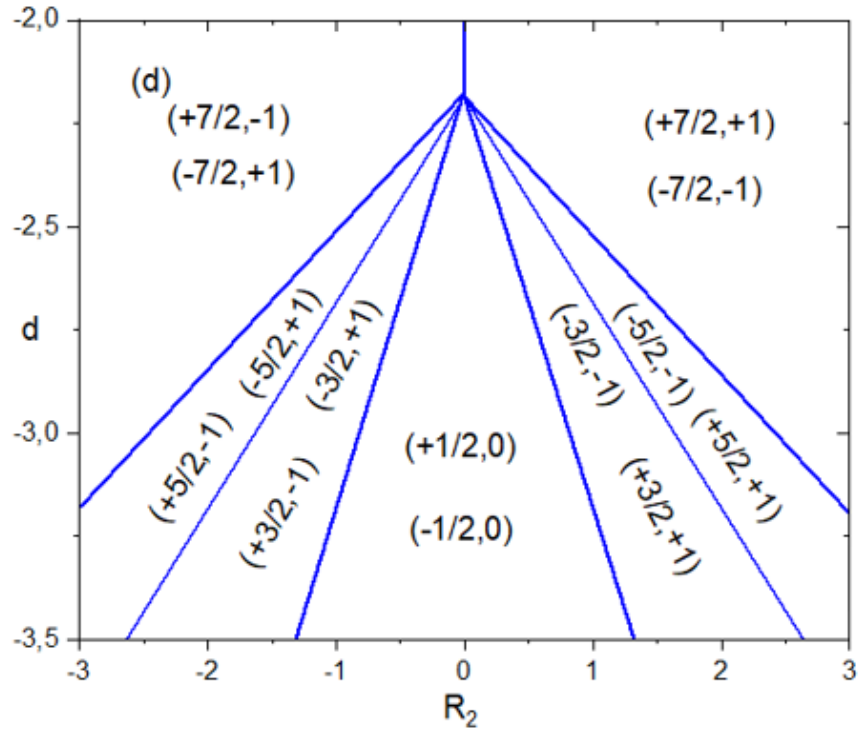
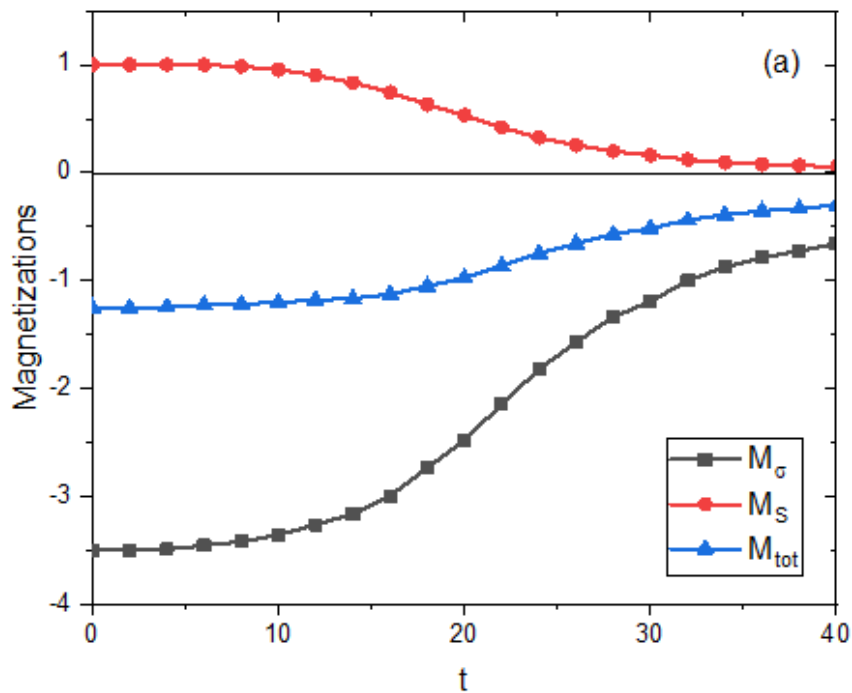


Fig. IV.2: Diagrammes de phase à l'état fondamental: (a) $R_1=1$ and $R_2 = -1$, (b) $R_1=1$ and $d=0$, (c) $R_2 = -1$ and $d=0$, (d) $R_1=1$ and $h=0$, (e) $R_2 = -1$ and $h=0$.

IV.1.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans cette sous-section, nous utilisons les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis pour explorer les propriétés magnétiques de la structure graphyne bicouche. Nous illustrons sur la Fig. IV.3.a les aimantations partielles (M_S et M_σ) et totale (M_{tot}) en fonction de la température réduite. Nous représentons cette figure en l'absence du champ cristallin réduit ($d = 0$) et pour $h=1$, $R_1=1$ et $R_2 = -1$. Les aimantations $M_\sigma=-7/2$ et $M_S=+1$ conduisent à $M_{tot} = \frac{-7/2+1}{2} = -1.25$ pour les très basses températures ($t \approx 0$). Ces valeurs des aimantations peuvent être confirmées par les diagrammes de phase de l'état fondamental (voir Fig. IV.2.a, IV.2.b, IV.2.c et IV.2.e). En effet, la Fig. IV.3.a montre que les aimantations diminuent et atteignent la phase paramagnétique ($M_{tot}=0$) pour de très grandes valeurs de température réduite. Afin d'étudier le comportement des susceptibilités, nous présentons sur la Fig. IV.3.b les susceptibilités magnétiques partielles (χ_S et χ_σ) et totale (χ_{tot}) en fonction de la température réduite pour les mêmes valeurs des paramètres utilisés pour la Fig. IV.3.a. La valeur de la température de transition réduite est $t_{tr} = 4$.



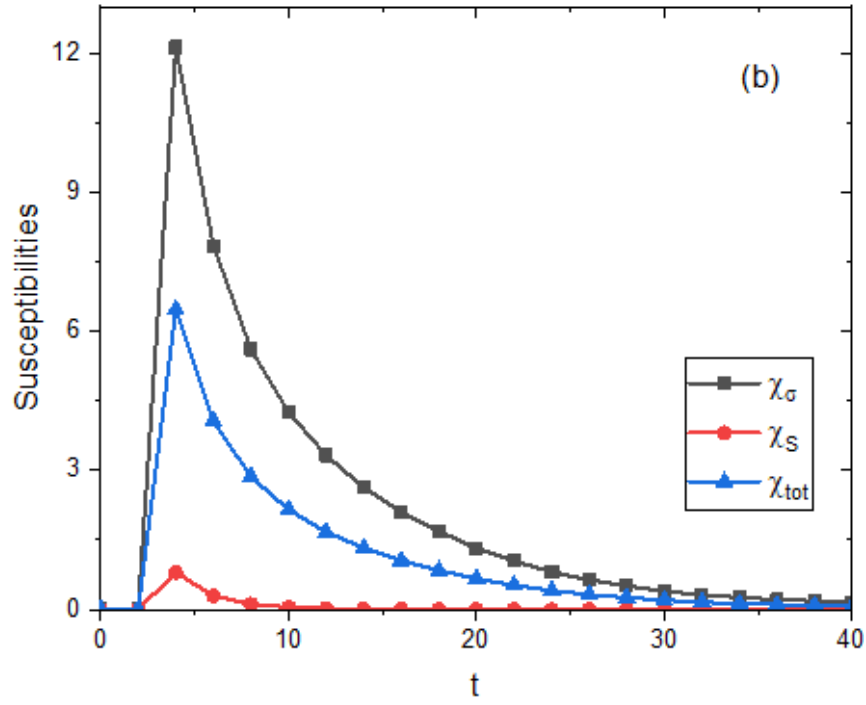


Fig. IV.3: (a) Aimantations et (b) susceptibilités en fonction de la température réduite

$$d=0, h=1, R_1=1 \text{ et } R_2=-1.$$

Pour examiner l'effet du paramètre ferrimagnétique R_2 entre les spins (S et σ) sur le comportement thermique de l'aimantation et de la susceptibilité totales, nous illustrons les résultats obtenus sur les Figs. IV.4.a et IV.4.b en l'absence du champ cristallin réduit ($d=0$) et pour $h=1$ et $R_1=1$. De la Fig. IV.4.a, il est claire qu'une augmentation de $|R_2|$ augmente la température de transition. Ceci est bien confirmé par déplacement des pics de susceptibilité totale vers les valeurs de température réduite observé sur la Fig. IV.4.b. En effet, pour $|R_2| = 1, 3$ et 5 , nous avons $t_{tr}=4, 8$ et 10 , respectivement.

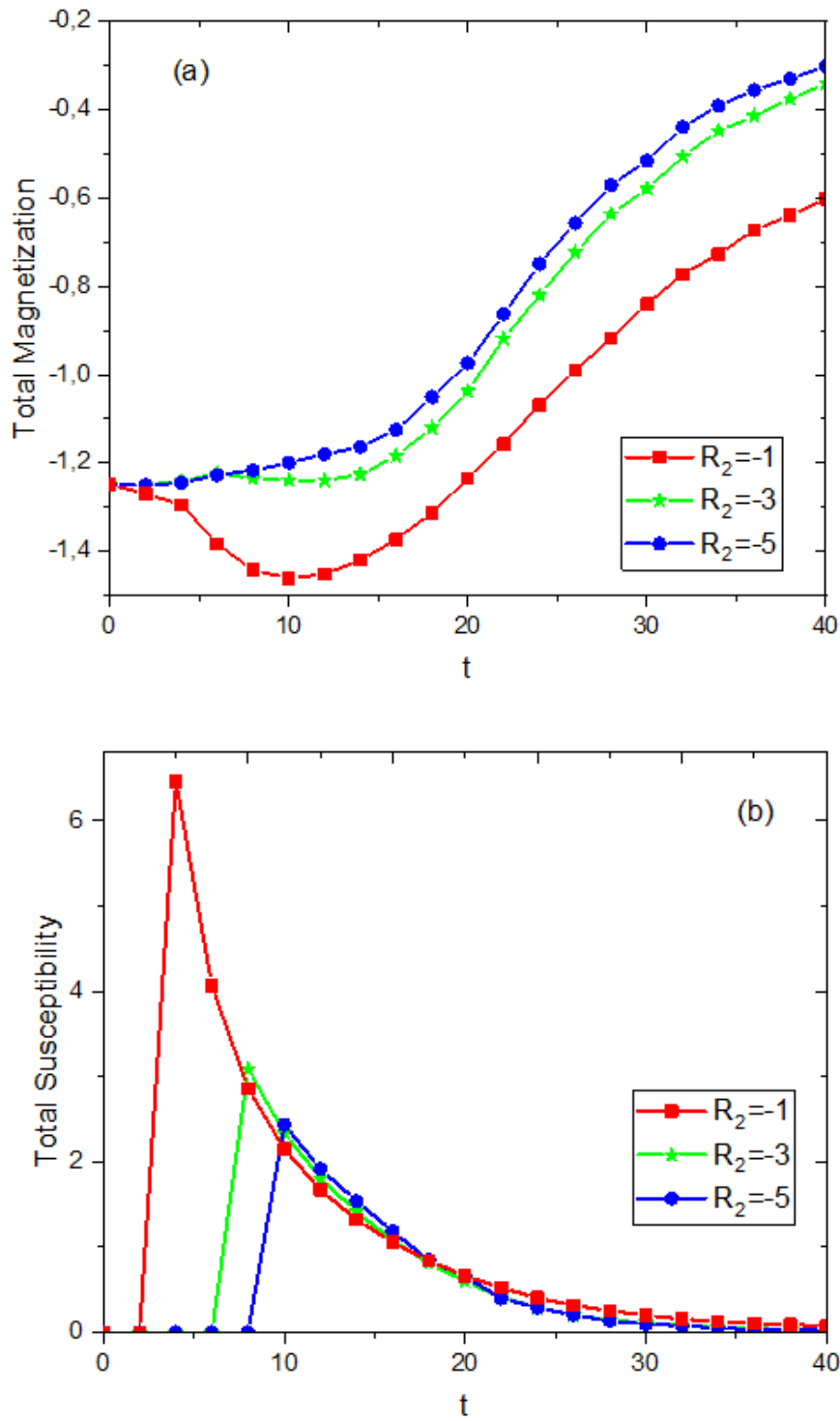


Fig. IV.4: (a) Aimantation et (b) susceptibilité totale en fonction de la température réduite pour : $d=0$, $h=1$ et $R_1=1$.

Par ailleurs, nous discutons sur la Fig. IV.5 l'effet du paramètre R_2 sur le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit. Cette figure est tracée pour $t=1.5$, $R_1=2$ et $h=1$. On note que les champs cristallins réduits d_{comp1} et d_{comp2} correspondent à l'aimantation totale nulle et valent : $d_{comp1} = -5.10, -6.74, -7.32$ et $d_{comp2} = -2.40, -3.30, -4.21$ pour $|R_2|=1, 3$ et 5 , respectivement. Les valeurs des paramètres d_{comp1} et d_{comp2} diminuent lors de l'augmentation de $|R_2|$.

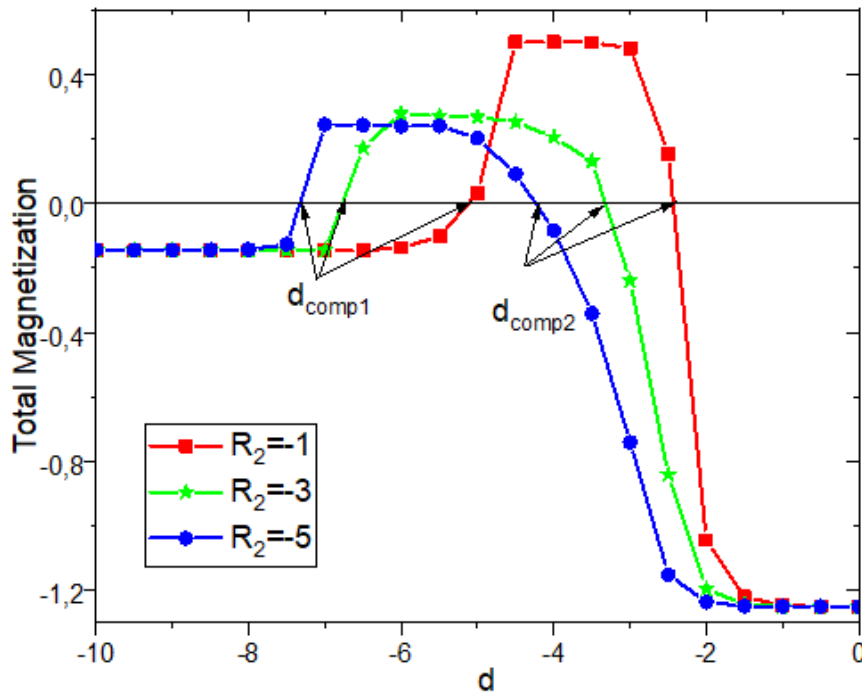
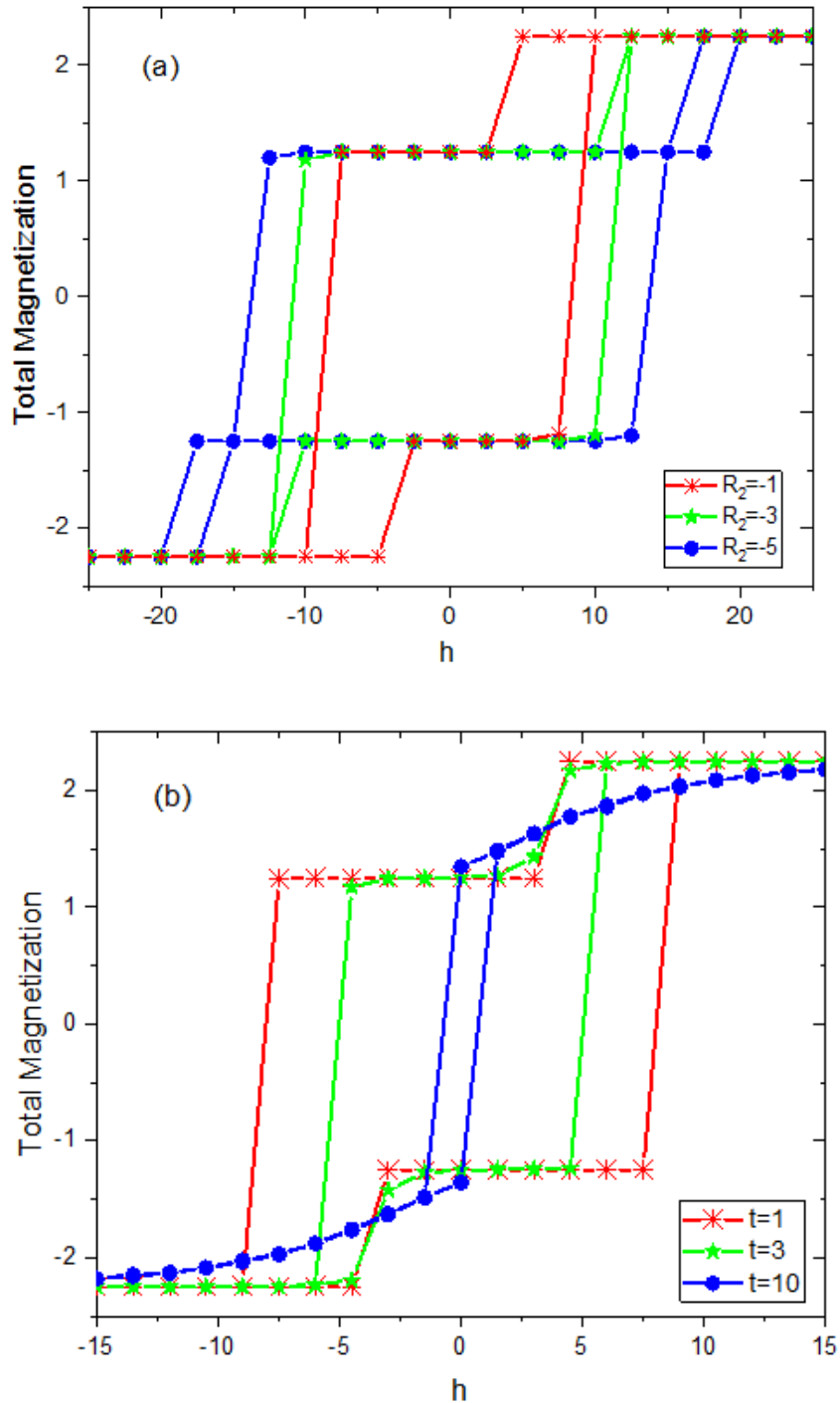


Fig. IV.5: Aimantation total en fonction du champ cristallin réduit pour : $t=1.5$, $R_1=2$ et $h=1$.

Enfin, nous étudions dans les Figs. IV.6. (a-c) les cycles d'hystérésis magnétiques de la structure graphyne bicouche. Nous illustrons sur la Fig. IV.6.a les résultats obtenus pour différentes valeurs du paramètre ferrimagnétique $R_2 = -1, -3$ et -5 et pour des valeurs fixes des paramètres réduits : $d=0$, $R_1=1$ et $t=1$. L'augmentation de $|R_2|$ augmente le champ coercitif magnétique conduisant à l'accroissement de la surface des boucles. Le même comportement a été signalé dans la Réf. [220]. De plus, pour la valeur fixe $|R_2| = 5$, trois boucles apparaissent dans le cycle d'hystérésis. En outre, nous avons présenté sur la Fig. IV.6.b l'effet de la température réduite sur les cycles d'hystérésis pour $d=0$, $R_1=1$ et $R_2 = -1$. Pour cela, nous avons pris les valeurs de

température réduite $t=1, 3$ et 10 . L'augmentation de la température diminue le champ coercitif et la surface des boucles. Un comportement similaire a été trouvé dans les Réfs. [165, 221, 222]. Enfin, pour terminer cette étude, la Fig. IV.6.c est tracée pour différentes valeurs du champ cristallin réduit : $d=0, -0.5, -1.5$ et -3 et pour des valeurs fixes de paramètres réduits : $R_1=1$, $R_2 = -1$ et pour $t=1$. Dans ce cas, l'augmentation en valeur absolue du champ cristallin diminue le champ coercitif et les boucles de surface. Le même résultat a été donné dans les Réfs [223, 224].



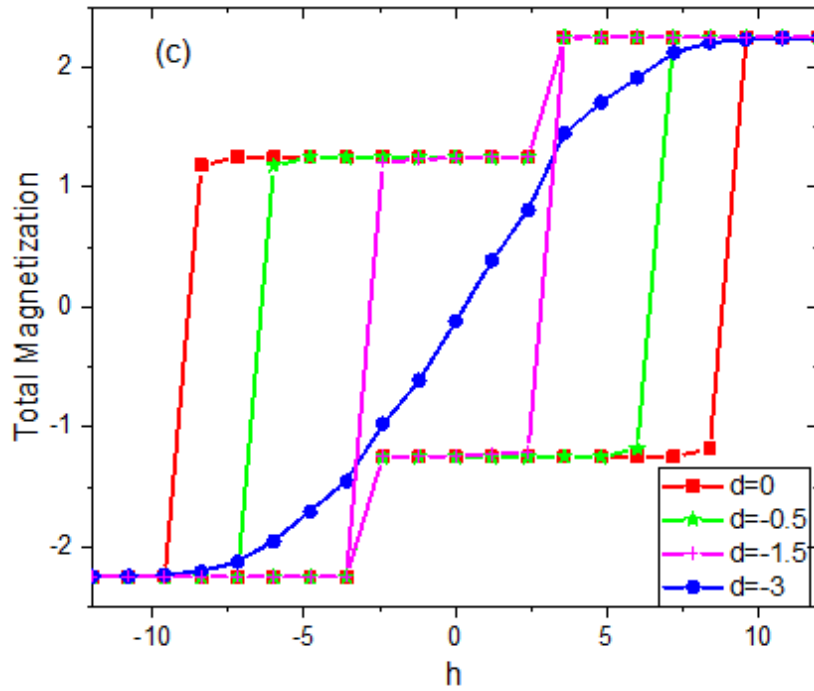


Fig. IV.6: Cycles d'hystérésis magnétiques de la structure bi-graphyne pour : (a) $d=0$, $R_1=1$ et $t=1$, (b) $d=0$, $R_1=1$ et $R_2 = -1$, (c) $R_1=1$, $R_2 = -1$ et $t=1$.

IV.2. Propriétés diélectriques d'une structure monocouche de nano-graphyne : Simulations de Monte Carlo

IV.2.1 Introduction

Les propriétés diélectriques d'un nanofil ferroélectrique à spins mixtes dans le cadre de Blume–Capel Ising [193], la structure bicouche anti-ferroélectrique/ferroélectrique BiFeO₃/YMnO₃ dans le champ électrique externe [194] et les nanotubes ferri-électriques à double paroi [195] ont été étudiées. Dans ce travail, nous nous intéressons à l'étude d'une structure de nano-graphyne monocouche, avec un demi-entier $\sigma=\pm 7/2$ et un spin entier $S=\pm 1$. L'originalité de ce travail réside sur l'investigation des propriétés thermodynamiques et diélectriques de cette structure, à l'aide de simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis.

IV.2.2 Présentation du système et de l'hamiltonien

Dans le présent travail, la structure nano-graphyne est étudiée sous les conditions aux limites libres. Le système consiste en une structure monocouche de nano-graphyne à spins mixtes $\sigma=\pm 7/2$ et $S=\pm 1$, ce qui donne un nombre total de spin $N = N_\sigma + N_S = 108$ (voir Fig. IV.7). N_σ et N_S sont le nombre total de spins σ et S , respectivement.

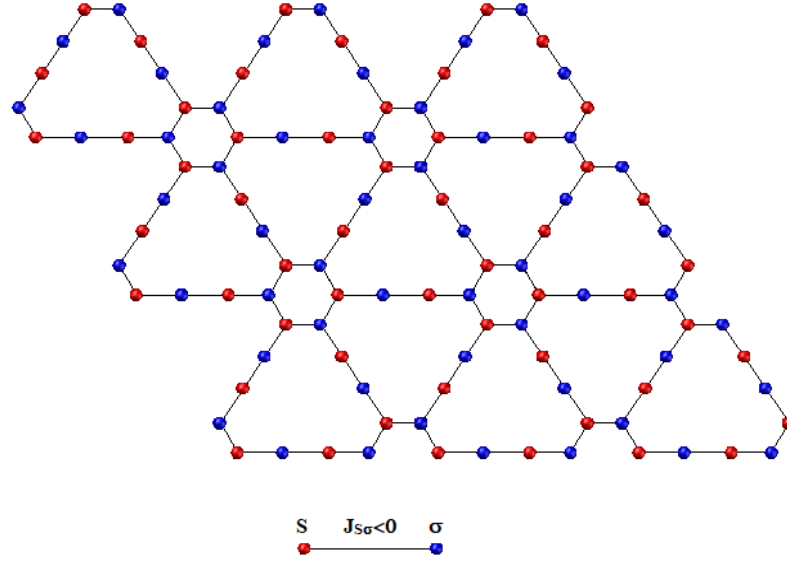


Fig. IV.7 : Représentation schématique d'une structure monocouche de nano-graphyne.

L'hamiltonien de Blume-Capel utilisé pour étudier le comportement électrique du système est donné par :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_{S\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^Z \sigma_j^Z - 2\mu E_Z \left(\sum_i S_i^Z + \sum_j \sigma_j^Z \right) \\ & - D_S \sum_i (S_i^Z)^2 - D_\sigma \sum_j (\sigma_j^Z)^2 \end{aligned} \quad (\text{IV. 2})$$

où $J_{S\sigma}$ représente l'interaction de couplage d'échange entre les deux voisins. S_i^Z et σ_j^Z sont les atomes de spin prenant respectivement les valeurs $7/2$ et 1 . Le paramètre μ représente le moment dipolaire, pour simplifier, nous prenons $\mu=1$. E_Z est le champ électrique externe longitudinal. Les champs cristallins D_S et D_σ agissent sur les spins S_i^Z et σ_j^Z , respectivement. Dans cette étude nous nous limiterons au cas particulier où $D=D_\sigma=D_S$.

IV.2.3 Résultats et discussion

Nous discutons dans cette section les résultats obtenus en utilisant les simulations Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. Nous commençons par examiner les diagrammes de phase à l'état fondamental ($T=0$) dans la sous-section IV.2.3.1. En outre, nous examinons les comportements thermiques des polarisations et des susceptibilités diélectriques et en fonction du champ cristallin et du champ électrique longitudinal externe dans la sous-section IV.2.3.2.

IV.2.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans cette sous-section, nous présentons les diagrammes de phase à l'état fondamental d'une structure de nano-graphyne monocouche à spins mixtes $S=\pm 1$ et $\sigma=\pm 7/2$. Le nombre d'états est $2S+1=3$ pour le spin S et $2\sigma+1=8$ pour le spin σ . Ce modèle conduit à $3 \times 8=24$ configurations possibles.

Dans la Fig. IV.8, nous étudions les effets du champ électrique longitudinal externe et du champ cristallin. Cette figure est présentée dans le plan (D, E_z) pour l'interaction de couplage d'échange fixe $J_{S\sigma}=-1$. Dans ce plan, il existe une symétrie parfaite des configurations par rapport à l'axe $E_z = 0$. Dans ce cas, le nombre de configurations stables est dix-huit, à savoir : $(-7/2,-1)$; $(-7/2,0)$; $(-5/2,-1)$; $(-3/2,-1)$; $(-1/2,-1)$; $(-1/2,0)$; $(-5/2,+1)$; $(-7/2,+1)$ et $(-3/2,+1)$ pour E_z négatif et $(+7/2,+1)$; $(+7/2,0)$; $(+5/2,+1)$; $(+3/2,+1)$; $(+1/2,+1)$; $(+1/2,0)$; $(+5/2,-1)$; $(+7/2,-1)$ et $(+3/2,-1)$ pour E_z positif.

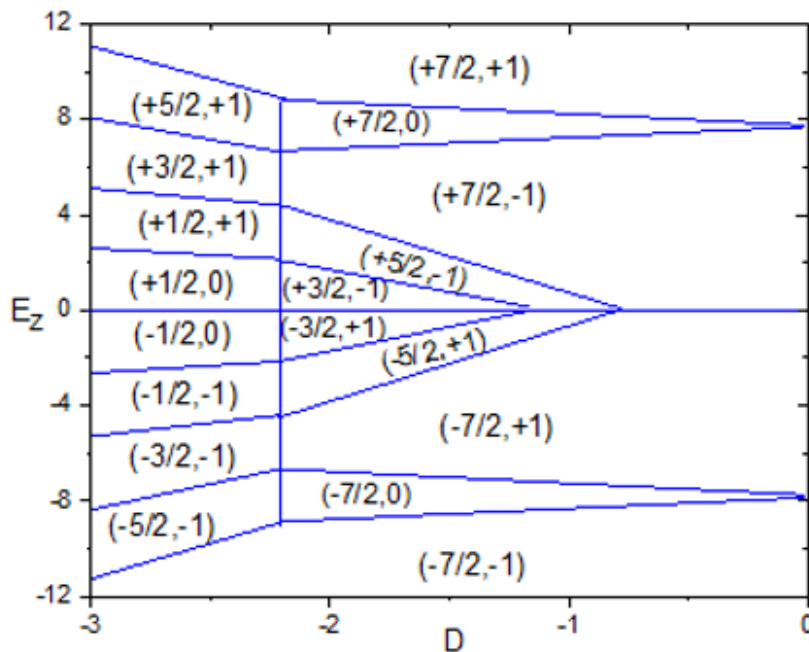
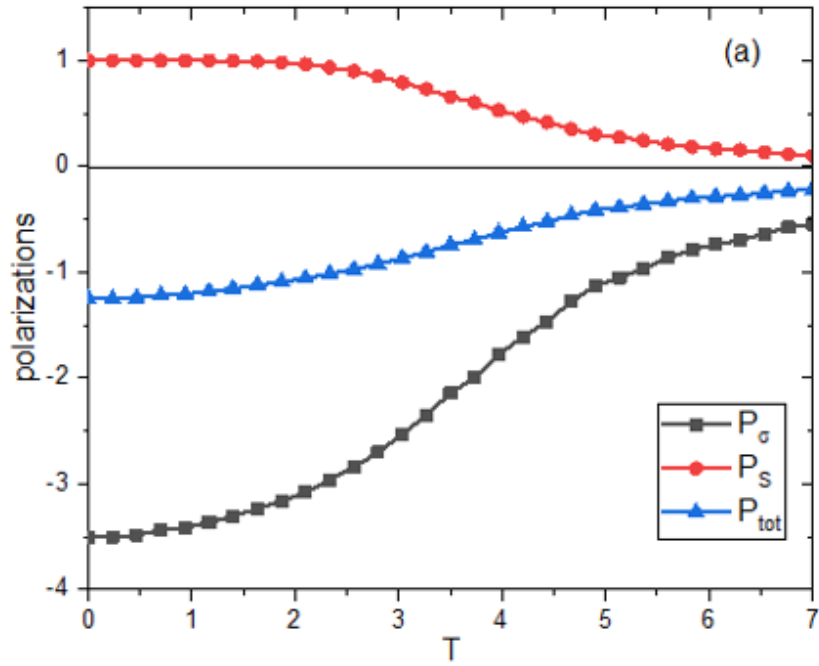


Fig. IV.8 : Diagramme de phase de l'état fondamental pour $J_{S\sigma}=-1$.

IV.2.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans cette sous-section, nous utilisons les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis pour étudier les propriétés de polarisation d'une structure de nano-graphyne monocouche. Sur la Fig. IV.9.a, nous présentons le comportement thermique des polarisations partielles (P_s and P_σ) et totale (P_{tot}). Cette figure est obtenue en l'absence du champ cristallin

($D=0$), pour une valeur fixe du champ électrique longitudinal externe $E_Z=0.1$ et pour une interaction de couplage d'échange $J_{S\sigma}=-1$. A très basses températures, les polarisations $P_\sigma=-7/2$ et $P_S=+1$ donnent $P_{\text{tot}}=\frac{-7/2+1}{2} = -1.25$. La valeur de la température de blocage ($T_B \approx 4.2$) est donnée par les pics de susceptibilités diélectrique partielles (χ_S et χ_σ) et total (χ_{tot}) représentés sur la Fig. IV.9.b. Cette figure est tracée pour les mêmes valeurs des paramètres utilisées pour la Fig. IV.9.a ($E_Z=0.1$ et $J_{S\sigma}=-1$).



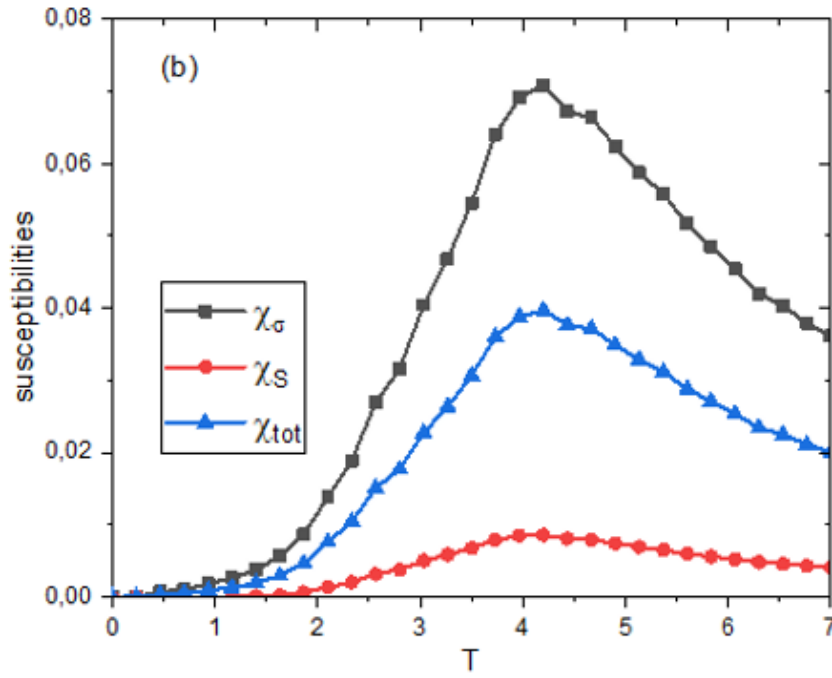


Fig. IV.9 : Polarisations (a) et susceptibilités (b) en fonction de la température pour des paramètres fixes : $D=0$, $E_Z=0.1$ et $J_{S\sigma}=-1$.

Afin de discuter l'effet de l'interaction de couplage d'échange ($J_{S\sigma}<0$) sur le comportement thermique des polarisations totales et des susceptibilités diélectriques totales, nous présentons sur les Fig. IV.10.a et IV.10.b les résultats obtenus. Ces figures sont tracées en l'absence du champ cristallin ($D=0$) et pour le paramètre fixe $E_Z=0.1$. La Fig. IV.10.a montre que l'augmentation en valeur absolue du paramètre ferri-électrique $|J_{S\sigma}|$ conduit à une augmentation de la température de blocage T_B . De plus, un tel comportement est confirmé par la Fig. IV.10.b. En effet, les pics de susceptibilité diélectrique totale sont déplacés vers les températures élevées. En effet, pour $|J_{S\sigma}|= 1, 2, 3, 4$ et 5 , les valeurs de la température de blocage sont $T_B \approx 4.2, 8, 12, 16$ et 19.5 , respectivement.

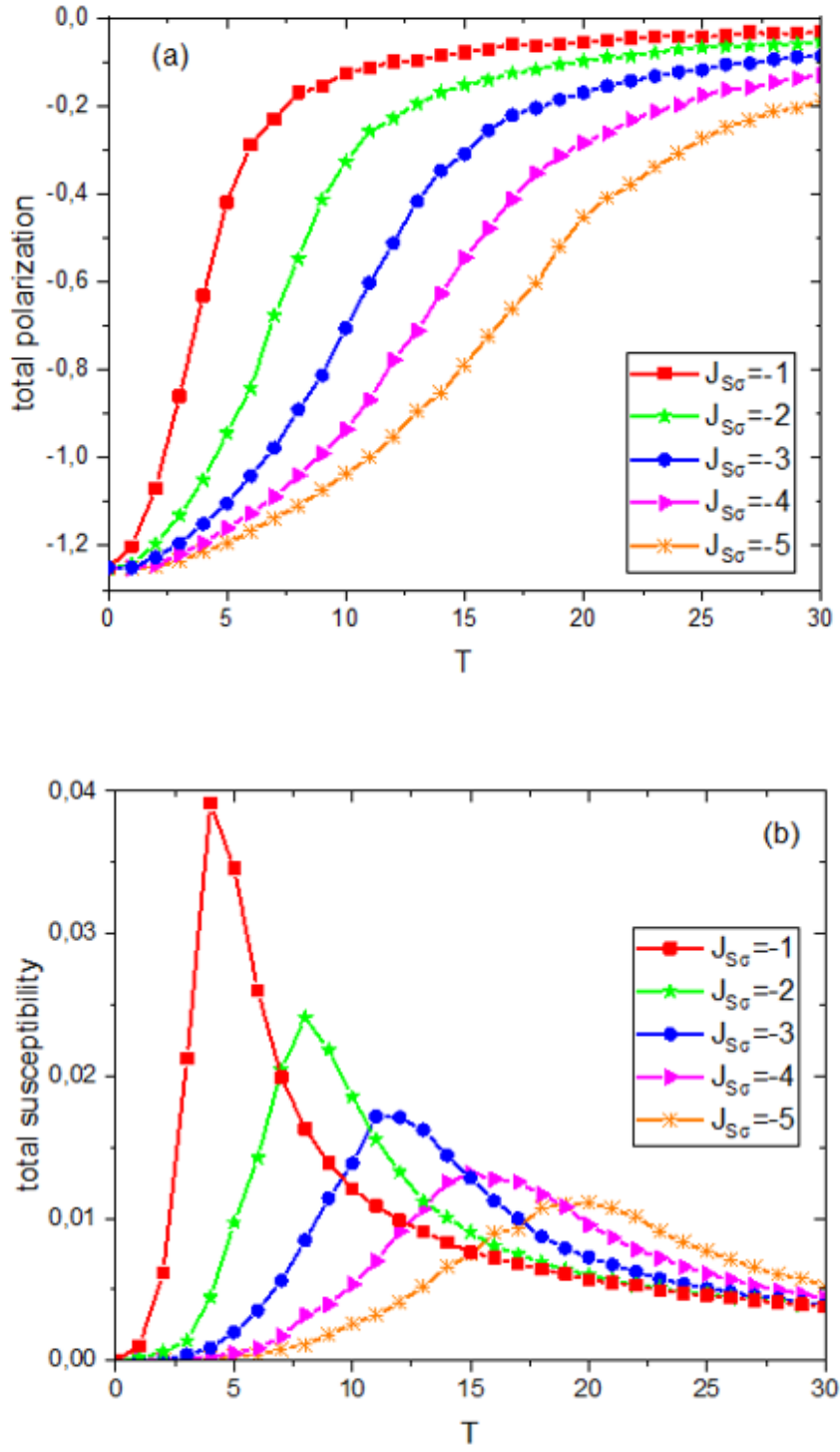
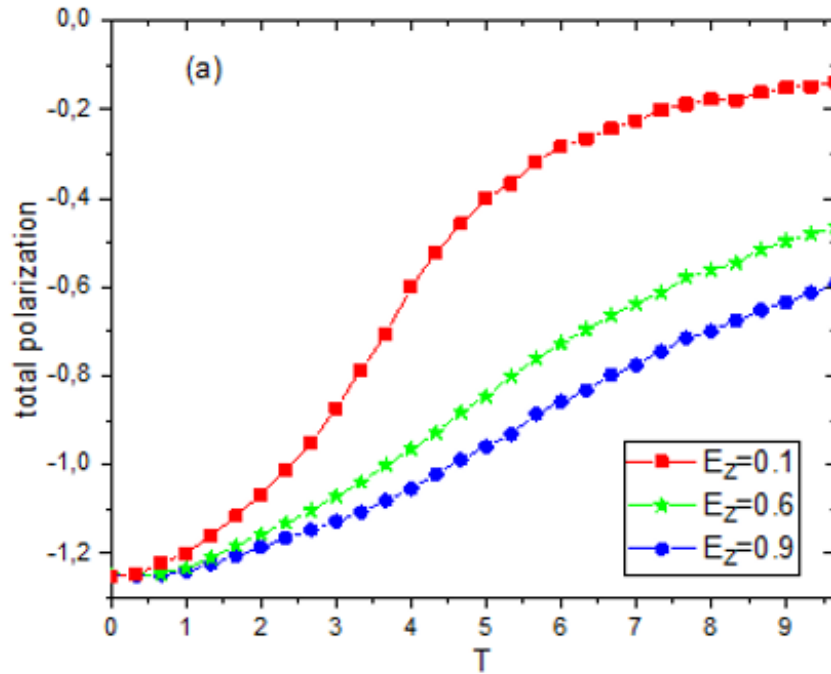


Fig. IV.10 : (a) Comportement thermique des polarisations totales et (b) des susceptibilités totales pour des paramètres fixes : $D=0$ et $E_z=0.1$ et pour différentes valeurs de $J_{S\sigma}$.

Pour examiner l'effet du champ électrique longitudinal externe E_z sur le comportement thermique des polarisations totales et des susceptibilités diélectriques totales, nous illustrons les Figs. IV.11.a et IV.11.b en l'absence de champ cristallin ($D=0$) et pour $J_{S_0}=-1$. Sur la Fig. 4.11.a, le point d'inflexion qui correspond à la température de blocage est retardé en augmentant la valeur du champ électrique longitudinal externe. De plus, la Fig. IV.11.b confirme ce comportement, l'augmentation des valeurs du champ électrique longitudinal provoque une translation des pics de la susceptibilité diélectrique totale vers les températures élevées. En effet, pour $E_z= 0.1, 0.6$ et 0.9 les valeurs de la température de blocage sont $T_B \approx 4.2, 6$ and 7 , respectivement.



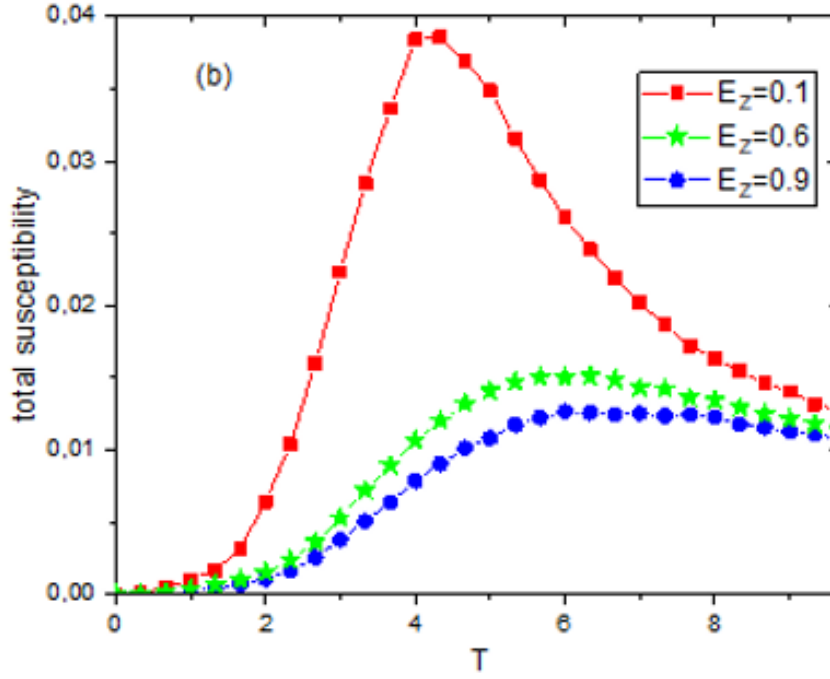


Fig. IV.11: Polarisations totales (a) et susceptibilités totales (b) en fonction de la température pour des paramètres fixes : $D=0$ et $J_{S\sigma}=-1$.

Par ailleurs, nous étudions dans la Fig. IV.12 l'effet du paramètre ferri-électrique $J_{S\sigma}$ sur le comportement des polarisations totales par rapport au champ cristallin. Cette figure est tracée pour les paramètres fixes : $T=1.5$ et $E_Z=0.1$. En effet, pour la valeur du champ cristallin ($D < -5$), le système est dans sa phase para-électrique ($P_{tot} \approx 0$) pour toutes les valeurs du paramètre ferri-électrique $J_{S\sigma}$. Dans l'intervalle $-5 < D < 0$, les polarisations totales diminuent et subissent une transition du second ordre. Quand la valeur absolue du paramètre ferrielectric $|J_{S\sigma}|$ augmente, la diminution de la polarisation totale apparaît très tôt. Enfin, pour $D > 0$, le système est dans sa phase ferri-électrique où la polarisation totale de saturation est $P_{sat} = -1.25$.

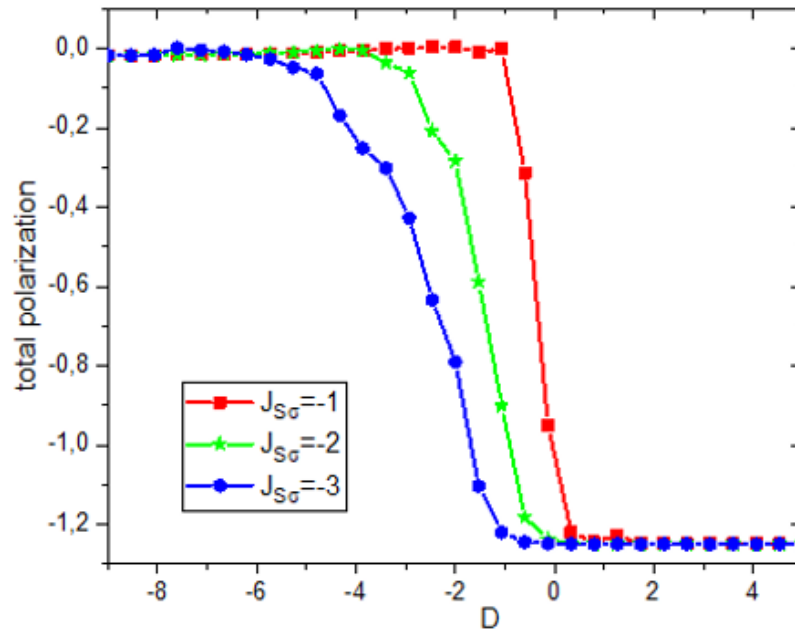
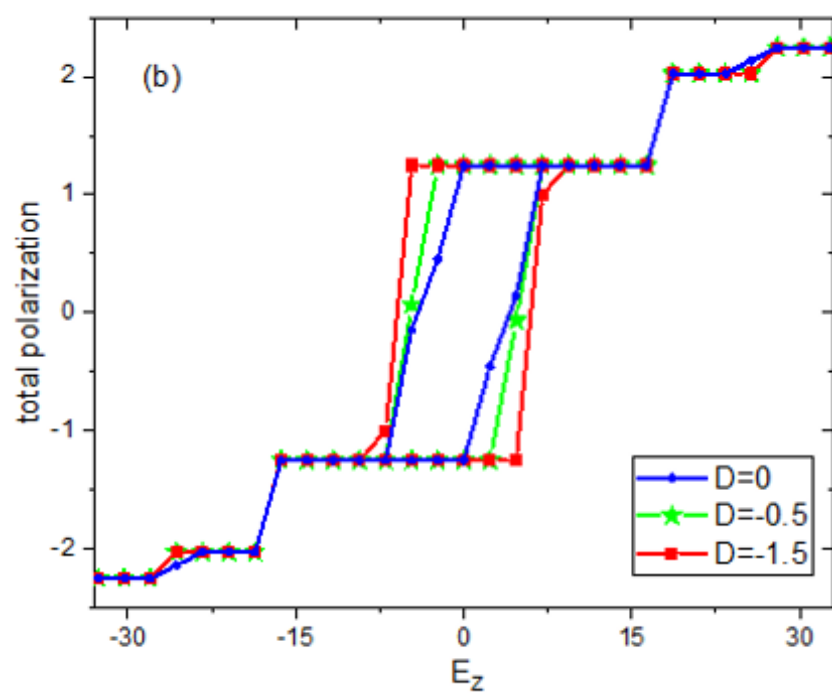
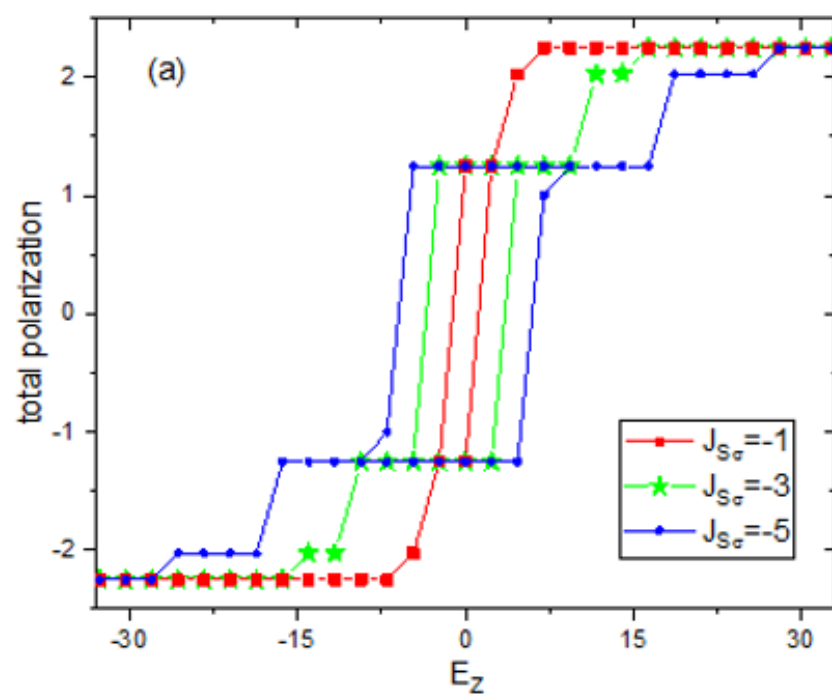


Fig. IV.12 : Polarisation totales en fonction du champ cristallin pour : $T=1.5$ et $E_z = 0.1$.

Finalement, nous présentons sur les Figs. IV.13.a, IV.13.b et IV.13.c les cycles d'hystérésis de la structure monocouche de nano-graphyne. Fig. IV.13.a est tracée pour différentes valeurs du paramètre ferri-électrique $J_{S\sigma} = -1, -3$ and -5 , en l'absence de champ cristallin ($D=0$) et pour une valeur fixe de la température $T=0.1$. Cette figure montre que l'accroissement du paramètre $|J_{S\sigma}|$ augmente le champ coercitif électrique entraînant une augmentation des surfaces des boucles, tandis que la rémanente électrique reste invariable. De plus, la Fig. IV.13.b est tracée pour différentes valeurs de champ cristallin : $D = 0, -0.5$ et -1.5 , pour $J_{S\sigma} = -5$ et $T=0.1$. À partir de cette figure, nous pouvons voir que l'augmentation en valeur absolue du champ cristallin $|D|$ augmente les surfaces des boucles. Enfin, nous étudions sur la Fig. IV.13.c l'effet thermique sur les cycles d'hystérésis pour différentes valeurs de la température : $T=0.1, 2$ et 5 , en l'absence de champ cristallin ($D=0$) et pour $J_{S\sigma} = -5$. Comme prévu, l'augmentation de la température diminue le champ coercitif et les surfaces des boucles.



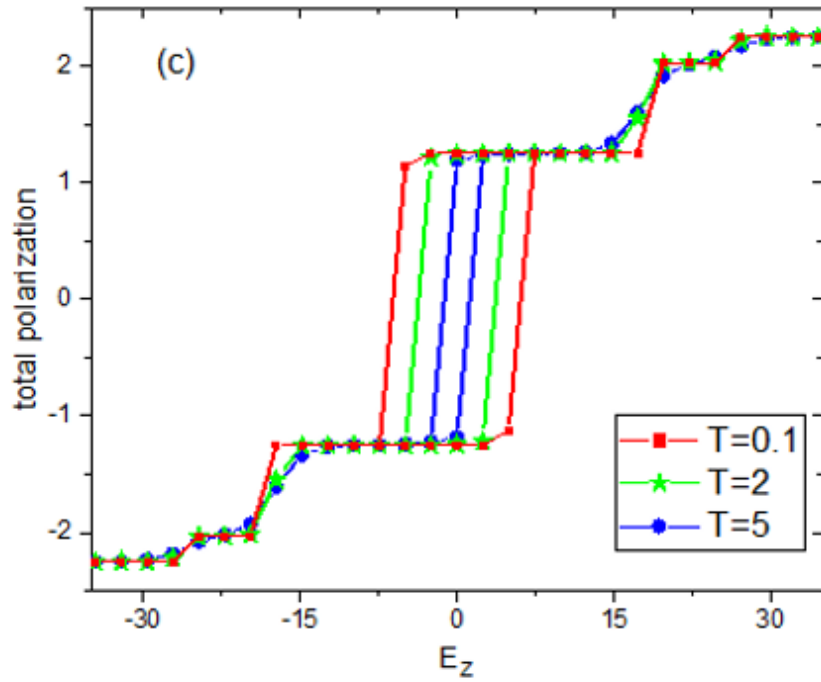


Fig. IV.13 : Cycles d'hystérésis d'une structure monocouche de nano-graphyne pour : (a) $D=0$ et $T=0.1$, (b) $J_{S\sigma}=-5$ et $T=0.1$, (c) $D=0$ et $J_{S\sigma}=-5$.

IV.3: Polarisation et susceptibilité diélectrique d'une nanostructure monocouche de type coronene : Etude par Simulations Monte Carlo

IV.3.1 Introduction

Concernant les réactions d'hydrogénation, les atomes de carbone d'un cycle central de HAP de taille moyenne comme une coronene ont des propriétés similaires aux atomes de carbone du graphite ou du graphène [225, 227]. Les géométries d'équilibre de la structure coronene hydrogénée [228] ou cation coronene [229] impliquent l'hydrogénation des cycles aromatiques alternés d'un côté du plan aromatique du coronene à l'autre.

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés thermiques et diélectriques de la nano-structure coronene, avec des spins mixtes ($S=\pm 2$, $\sigma = \pm 5/2$), utilisant les simulations Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis.

IV.3.2 Présentation du système et de l'hamiltonien

Dans notre travail, nous étudions la nano-structure monocouche de type coronene dans le cadre du modèle de Blume-Capel sous les conditions aux limites libres. Le nombre total de spins de

la nano-structure étudié est $N_{\text{tot}} = N_S + N_\sigma = 36$ (voir Fig. IV.14) où $N_S = 12$ et $N_\sigma = 24$, avec les spins $S = \pm 2, \pm 1, 0$ et $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$.

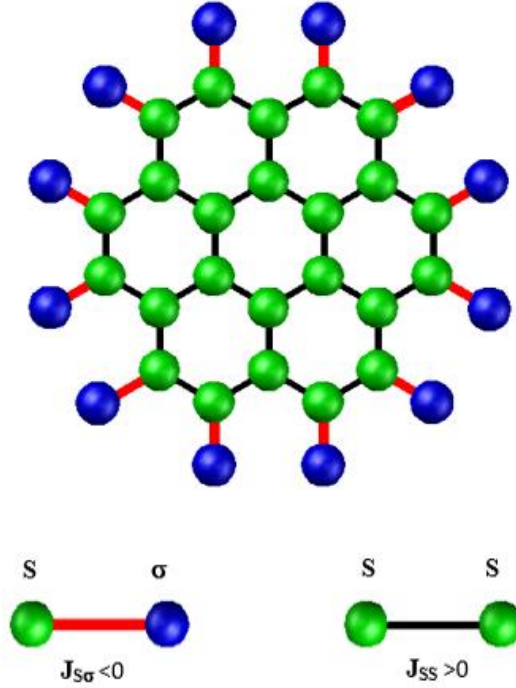


Fig. IV.14: Illustration schématique de la nano-structure monocouche de type coronene.

L'hamiltonien de la nano-structure monocouche de type coronene est donné par :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^Z S_j^Z - J_{S\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} S_k^Z \sigma_l^Z - 2\mu E_Z \left(\sum_i S_i^Z + \sum_j \sigma_j^Z \right) \\ & - D_S \sum_i (S_i^Z)^2 - D_\sigma \sum_j (\sigma_j^Z)^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.3})$$

où J_{SS} et $J_{S\sigma}$ sont les paramètres de couplage d'échange entre les premiers atomes voisins S–S et S– σ , respectivement.

L'indice de sommation $\langle i, j \rangle$ et $\langle k, l \rangle$ représente les premiers spins d'atomes proches voisins. Le paramètre μ désigne le moment dipolaire. Par simplicité, nous prenons $\mu=1$. E_Z désigne le champ électrique longitudinal externe. Les champs cristallins D_S et D_σ agissent respectivement sur les spins S_i^Z et σ_j^Z . Dans nos calculs numériques, nous nous limiterons l'étude au cas où $D=D_\sigma=D_S$. Le calcul d'erreur, des polarisations et des susceptibilités, est accompli selon les statistiques de Fabian et Leonhardt [230].

IV.3.3 Résultats et discussion

Nous discutons dans cette section les résultats obtenus en utilisant les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis. Tout d'abord, nous commençons par examiner les diagrammes de phase de l'état fondamental dans la sous-section IV.3.3.1. Puis, nous explorons les comportements thermiques des polarisations et des susceptibilités, en fonction du champ cristallin et du champ électrique longitudinal externe dans la sous-section IV.3.3.2.

IV.3.3.1 Diagrammes de phases à l'état fondamental

Dans cette sous-section, nous discutons des diagrammes de phase de l'état fondamental d'une nano-structure monocouche de type coronene à spins mixtes ($S=\pm 2$, $\sigma=\pm 5/2$) pour différents paramètres physiques. Le nombre d'états pour le spin- S est $2S+1=5$ et pour le spin- σ est $2\sigma+1=6$. Un tel système conduit à $5 \times 6 = 30$ configurations possibles.

Nous commençons, sur la Fig. IV.15.a, par explorer les effets des champs électriques et cristallins longitudinaux externes. Cette figure est tracée dans le plan (E_z, D) pour les interactions de couplage d'échange fixe $J_{S\sigma} = -1$ et $J_{SS} = 1$. Dans ce plan, toutes les phases stables se retrouvent du côté du champ cristallin négatif tout en respectant la symétrie de ces configurations par rapport à l'axe $E_z = 0$. Dix-huit configurations sont stables, à savoir: $(-5/2, -2)$; $(-5/2, +2)$; $(+5/2, -2)$; $(+5/2, +2)$; $(-3/2, -2)$; $(-3/2, +2)$; $(+3/2, -2)$; $(+3/2, +2)$; $(-1/2, -2)$; $(-1/2, +2)$; $(+1/2, -2)$; $(+1/2, +2)$; $(-1/2, -1)$; $(-1/2, +1)$; $(+1/2, -1)$; $(+1/2, +1)$; $(+1/2, 0)$ et $(-1/2, 0)$.

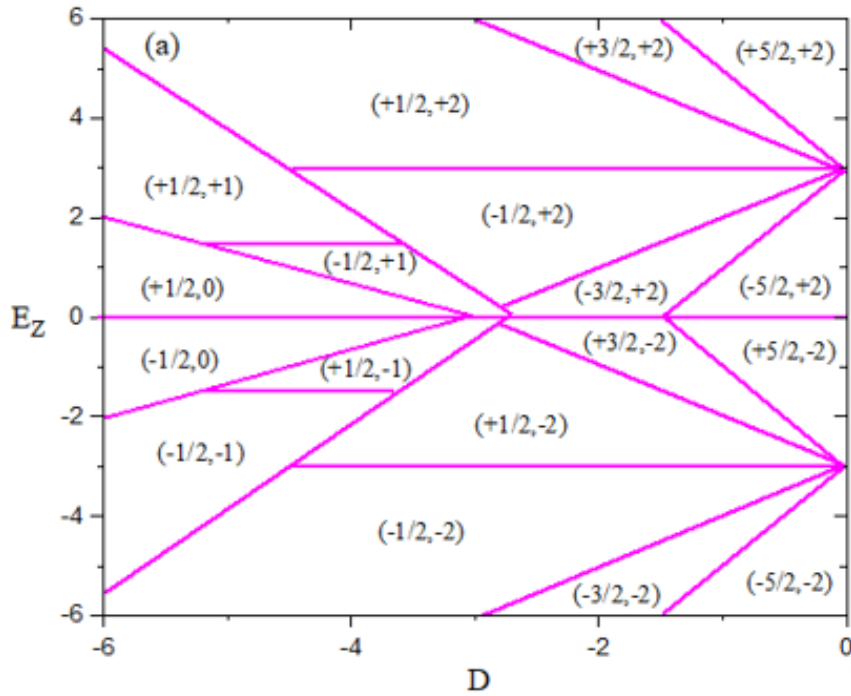
La Fig. IV.15.b est présentée dans le plan (E_z, J_{SS}) , en l'absence du champ cristallin et pour le paramètre de couplage d'échange fixe $J_{S\sigma} = -1$. Les dix phases stables sont trouvées pour les $J_{SS} < 0$. De plus, une symétrie parfaite est observée pour $E_z = 0$. Les phases stables sont : $(+5/2, +2)$; $(-5/2, +2)$; $(+5/2, +1)$; $(-5/2, +1)$ et $(+5/2, 0)$ pour $E_z > 0$, $(+5/2, -2)$; $(-5/2, -2)$; $(+5/2, -1)$; $(-5/2, -1)$ et $(-5/2, 0)$ pour $E_z < 0$.

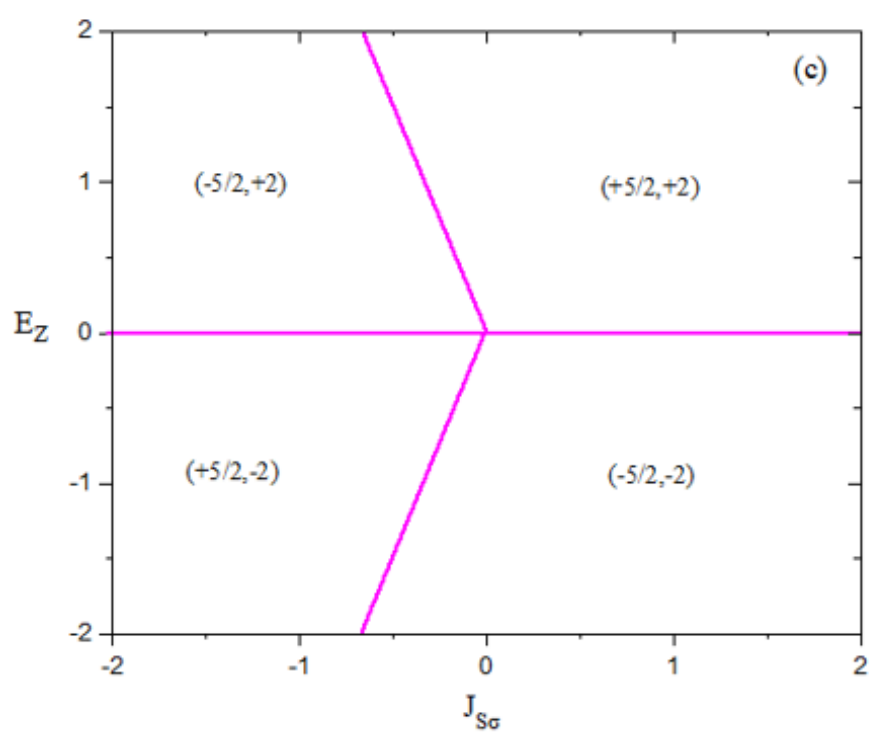
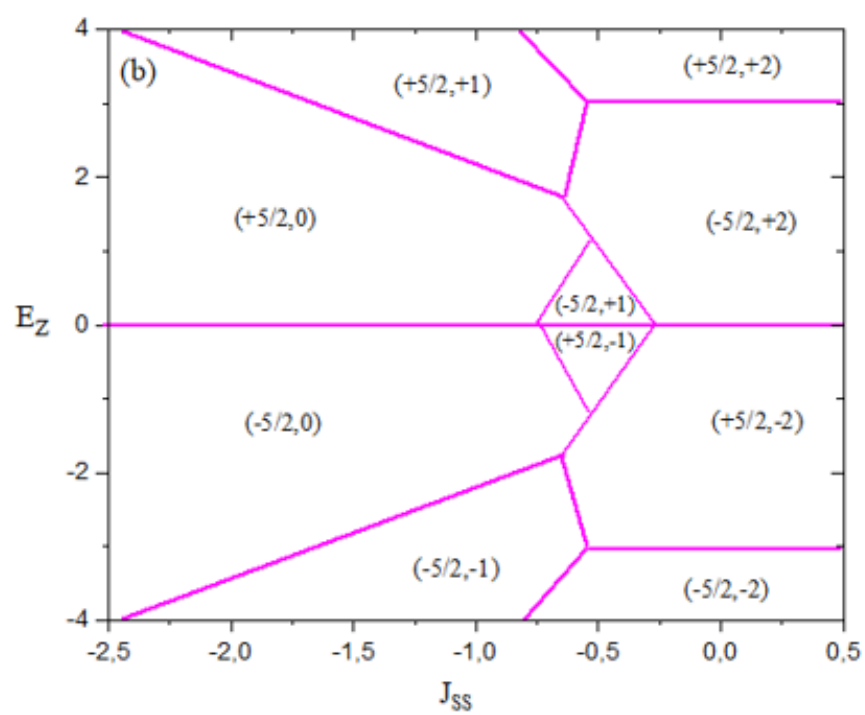
La Fig. IV.15.c illustre le diagramme de phase dans le plan $(E_z, J_{S\sigma})$. Cette figure montre les effets du paramètre ferri-électrique ($J_{S\sigma}$) et du champ électrique longitudinal externe (E_z) pour $D=0$ et $J_{SS}=1$. Cette figure ne présente que quatre phases stables, à savoir : $(+5/2, +2)$; $(+5/2, -2)$; $(-5/2, -2)$ et $(-5/2, +2)$. Notons que les quatre phases coexistent dans le point $(E_z=0, J_{S\sigma}=0)$.

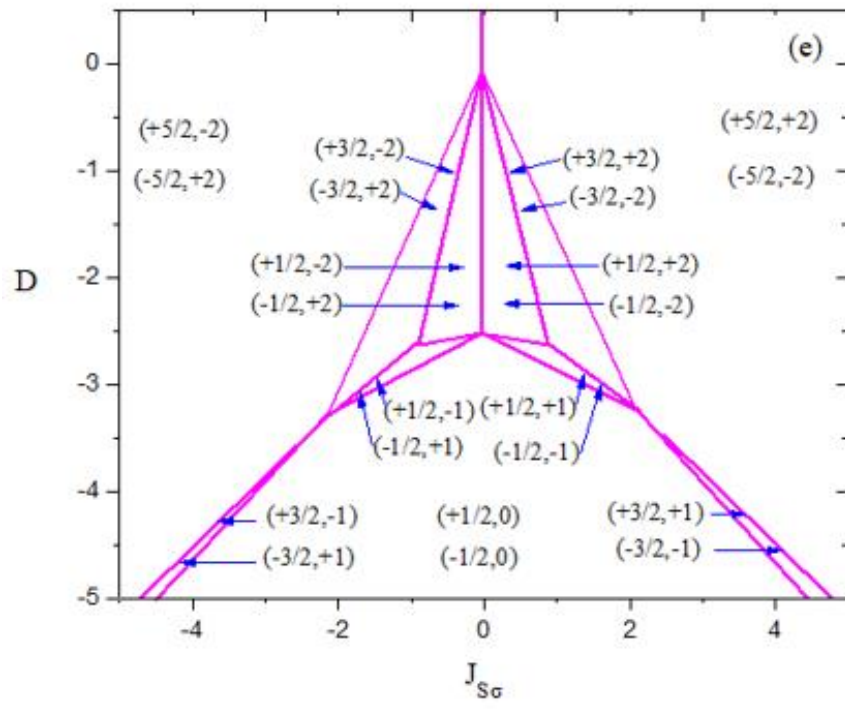
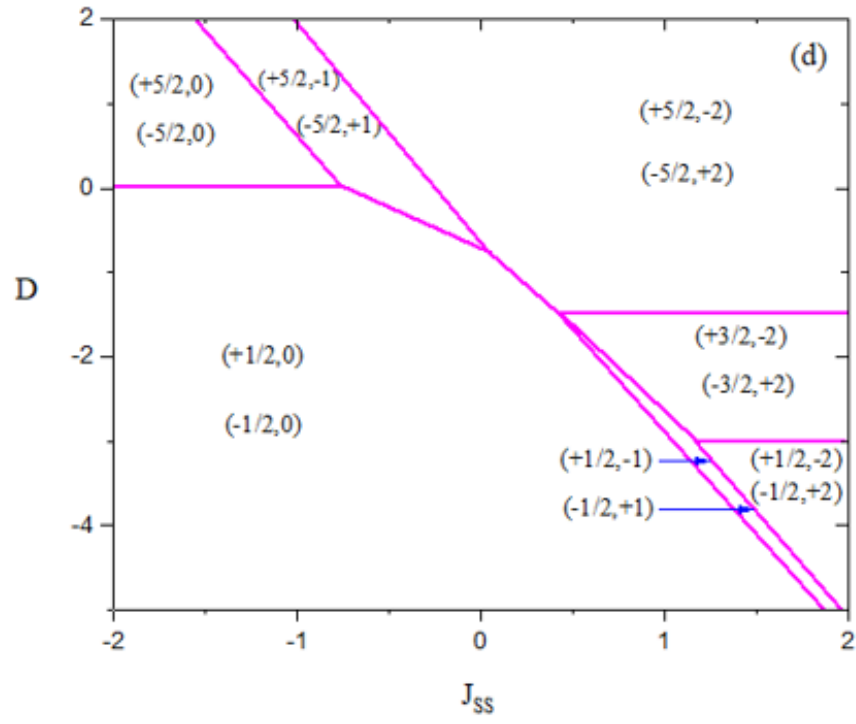
En outre, la Fig. IV.15.d est présentée dans le plan (D, J_{SS}) pour les paramètres fixes : $E_z=0$ et $J_{S\sigma}=-1$. Sur cette figure, quatorze configurations sont stables, à savoir: $(+5/2, 0)$; $(-5/2, 0)$; $(+1/2, 0)$; $(-1/2, 0)$; $(+5/2, -1)$; $(-5/2, +1)$; $(+5/2, -2)$; $(-5/2, +2)$; $(+3/2, -2)$; $(-3/2, +2)$; $(+1/2, -2)$; $(-1/2, +2)$; $(+1/2, -1)$ et $(-1/2, +1)$.

D'un autre côté, nous présentons la Fig. IV.15.e dans le plan $(D, J_{S\sigma})$. Cette figure est illustrée en l'absence du champ électrique longitudinal externe ($E_Z=0$) et pour le paramètre $J_{SS}=1$. Cette figure présente vingt-deux phases stables. Les phases stables qui apparaissent sur cette figure sont les mêmes que celles obtenues sur la Fig. IV.15.a, plus la présence de quatre nouvelles phases qui sont : $(-3/2, -1)$; $(-3/2, +1)$; $(+3/2, -1)$; $(+3/2, +1)$.

Enfin, pour examiner l'effet du paramètre ferri-électrique $J_{S\sigma}$ et du paramètre de couplage d'échange J_{SS} sur les phases stables, nous illustrons la Fig. IV.15.f dans le plan $(J_{SS}, J_{S\sigma})$ pour $E_Z=0$ et $D=0$. Cette figure montre quatorze configurations stables : $(+5/2, +2)$; $(+5/2, -2)$; $(-5/2, -2)$; $(-5/2, +2)$; $(+5/2, +1)$; $(+5/2, -1)$; $(-5/2, -1)$; $(-5/2, +1)$; $(+5/2, 0)$; $(-5/2, 0)$; $(+3/2, 0)$; $(-3/2, 0)$; $(+1/2, 0)$ et $(-1/2, 0)$.







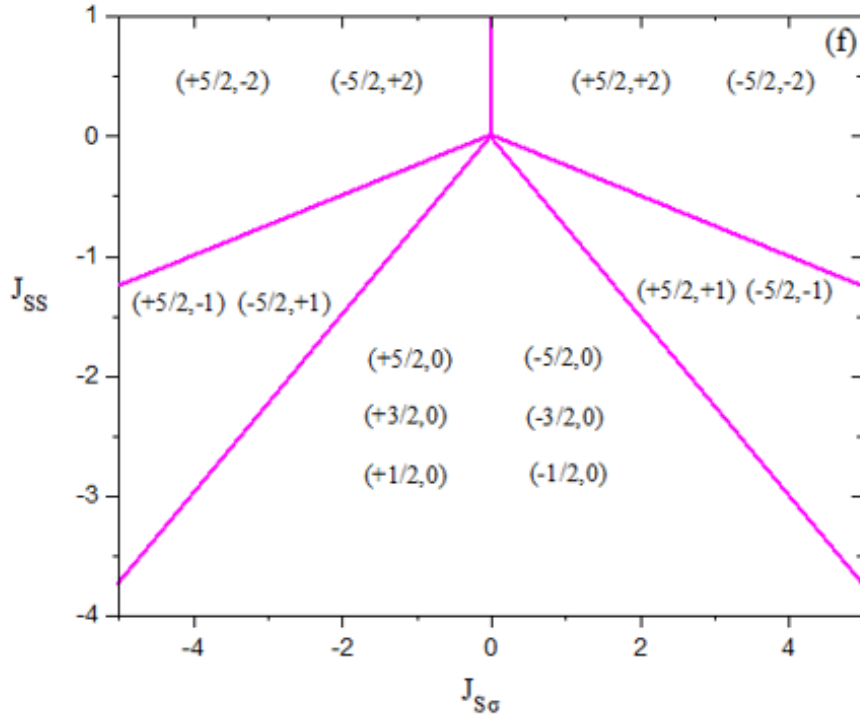


Fig. IV.15: Diagrammes de phase de l'état fondamental de la nano-structure monocouche de type coronene : (a) : $J_{S\sigma}=-1$ et $J_{SS}=1$, (b): $D=0$ et $J_{S\sigma}=-1$, (c): $D=0$ et $J_{SS}=1$, (d) : $J_{S\sigma} = -1$ et $E_Z=0$, (e) : $E_Z=0$ et $J_{SS}=1$, (f) : $E_Z=0$ et $D=0$.

IV.3.3.2 Simulations Monte Carlo

Dans cette sous-section, utilisant les simulations Monte Carlo avec l'algorithme Metropolis, nous étudions les propriétés diélectriques de la nano-structure monocouche de type coronene. La Fig. IV.16.a montre le comportement des polarisations partielles (P_S et P_σ) et totale (P_{tot}) en fonction de la température. Cette figure est tracée en l'absence du champ cristallin ($D = 0$) et pour $E_Z=3$, $J_{S\sigma}= -0.5$ et $J_{SS}=1$. A très basses températures ($T \approx 0.0001$), les polarisations $P_S=+2$ et $P_\sigma = +5/2$ conduisent à une valeur de polarisation totale $P_{tot} = \frac{24 \times P_S + 12 \times P_\sigma}{24 + 12} = 2.16$. Ces valeurs de spin sont en harmonie avec les configurations présentées sur les Figs. IV.15. (a, b, c, e et f). En augmentant la température, les polarisations décroissent et le système tend vers la phase para-électrique ($P_{tot} \approx 0$) pour $T > T_B$ (T_B est la température de blocage). De plus, nous illustrons sur la Fig. IV.16.b, les susceptibilités diélectriques partielles et totales en fonction de la température, pour les mêmes valeurs des paramètres que ceux utilisés pour la Fig. IV.16.a. La valeur de la température de blocage est déterminée par le pic de la susceptibilité diélectrique totale et est $T_B \approx 17$.

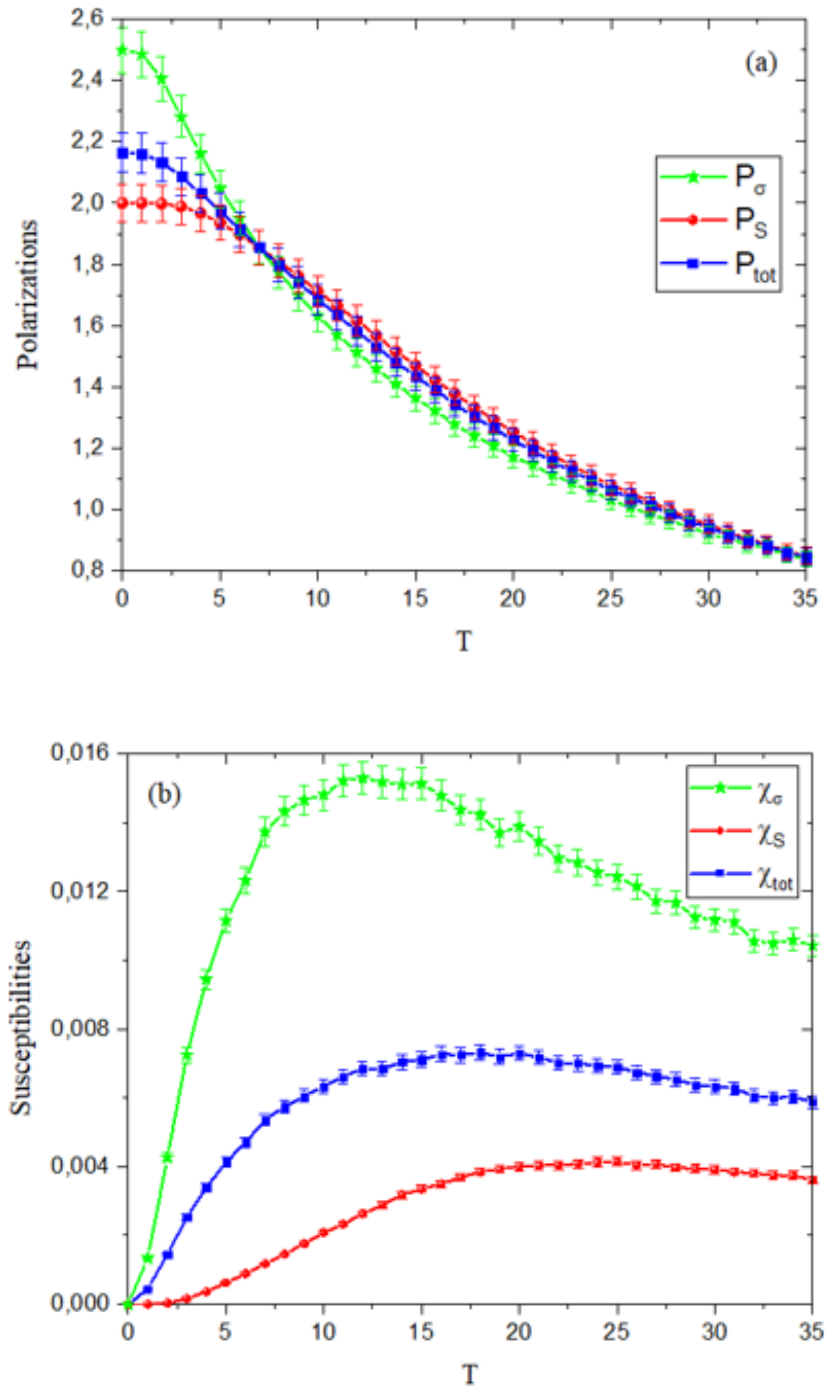
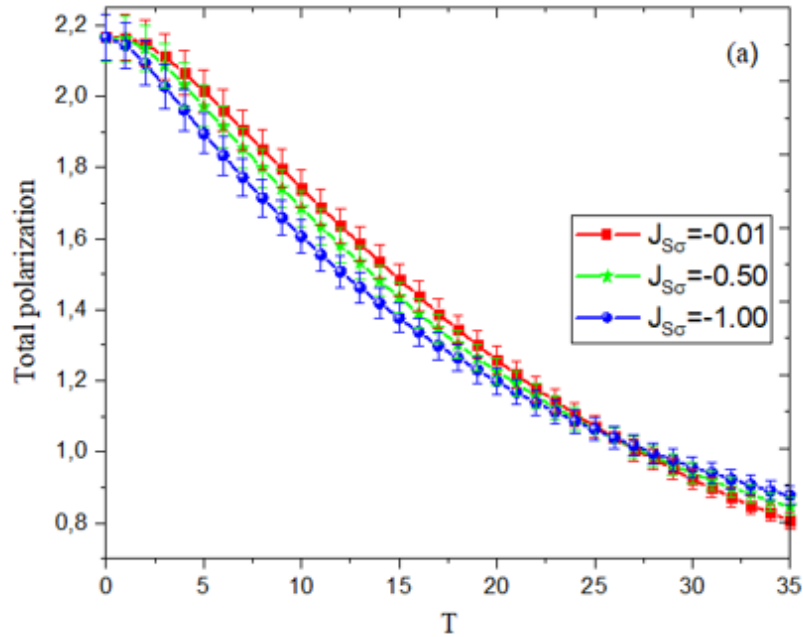


Fig. IV.16: Polarisations thermiques (a) et les susceptibilités diélectriques (b) pour les paramètres : $D = 0$, $E_z = 3$, $J_{S\sigma} = -0.5$ et $J_{SS} = 1$.

À partir des Figs. IV.17.a et IV.17.b, nous explorons l'influence du paramètre ferri-électrique $J_{S\sigma}$, entre les spins S et σ , sur le comportement thermique de la polarisation totale et de la susceptibilité diélectrique. Ces figures sont tracées pour différentes valeurs de paramètres ferri-électriques ($J_{S\sigma} = -0.01, -0.50$ et -1), en l'absence du champ cristallin, pour un champ électrique longitudinal externe fixe $E_z=3$ et pour une interaction de couplage d'échange $J_{SS} = 1$. Sur la Fig. IV.17.a, nous remarquons que la décroissance des polarisations totales est accentuée par l'augmentation des valeurs du paramètre ferri-électrique $|J_{S\sigma}|$. D'autre part, pour connaître précisément les valeurs de température de blocage, nous présentons sur la Fig. IV.17.b les susceptibilités diélectriques totales. Le déplacement des pics des susceptibilités diélectriques totales vers les valeurs à basse température peut être observé en augmentant la valeur du paramètre $|J_{S\sigma}|$. Les valeurs de la température de blocage obtenues pour le cas des paramètres ferri-électriques $|J_{S\sigma}| = 0.01, 0.50$ et 1 , sont $T_B = 22, 18$ et 13 , respectivement.



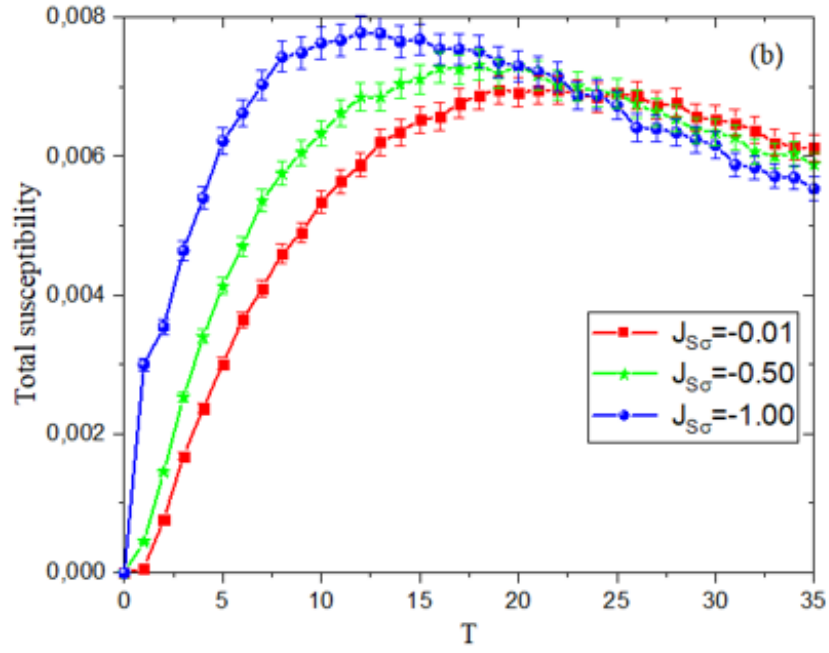


Fig. IV.17 : Polarisation thermique totale (a) et la susceptibilité diélectrique totale (b) pour les paramètres fixes : $D=0$, $E_z=3$ et $J_{SS}=1$.

Nous illustrons maintenant, sur les Figs. IV.18.a et IV.18.b, l'effet de l'interaction de couplage d'échange J_{SS} sur le comportement thermique de la polarisation totale et de la susceptibilité diélectrique. Ces figures sont tracées pour différentes valeurs d'interaction de couplage d'échange ($J_{SS}=1, 1.5$ et 2) et pour $D=0$, $E_z=3$ et $J_{S\sigma} = -0.5$. Sur la Fig. IV.18.a, la diminution des polarisations est retardée en augmentant les valeurs J_{SS} d'interaction de couplage d'échange. En effet, la Fig. IV.18.b confirme ce comportement car l'augmentation des valeurs du paramètre J_{SS} augmente la valeur de la température de blocage. Les valeurs de la température de blocage obtenues pour le cas des interactions de couplage d'échange $J_{SS} = 1, 1.5$ et 2 sont $T_B = 19, 24$ et 29 , respectivement.

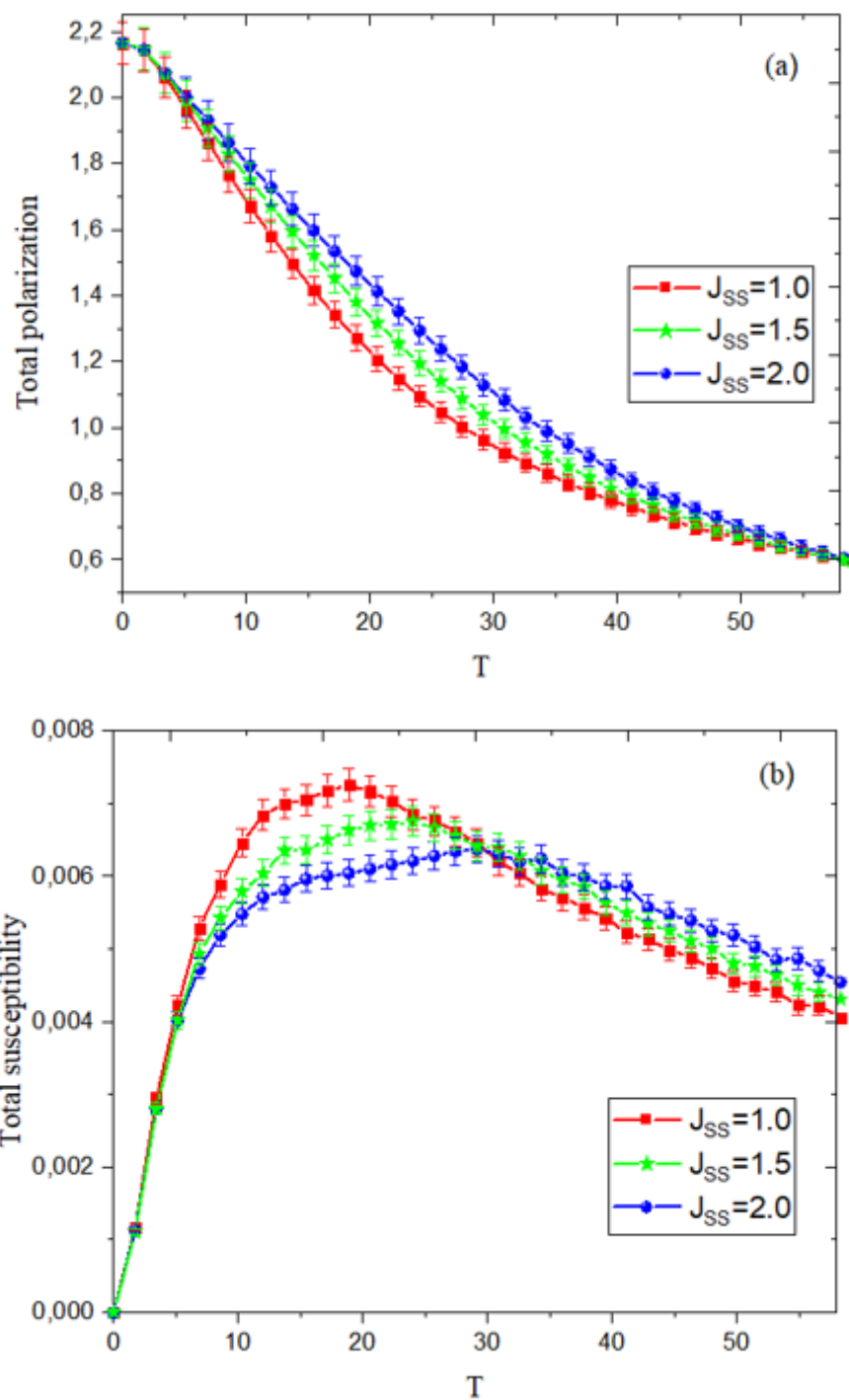


Fig. IV.18 : Polarisation thermique totale (a) et la susceptibilité diélectrique totale (b) pour des paramètres fixes : $D=0$, $E_z=3$ et $J_{s\sigma} = -0.5$.

Les Figs. IV.19.a et IV.19.b présentent le comportement de la polarisation totale (P_{tot}) en fonction du champ cristallin (D) pour une basse température fixe $T=0.2$ et un champ électrique longitudinal externe $E_z=3$. Nous traçons la Fig. IV.19.a pour différentes valeurs du paramètre ferri-électrique ($J_{S\sigma} = -1, -1.5$ et -2) et pour la valeur d'interaction de couplage d'échange fixe $J_{SS}=1$. En fait, nous pouvons distinguer trois régions sur le comportement de la polarisation totale. La première région (i) où la polarisation totale (P_{tot}) est indépendante de D et vaut 0.5. La deuxième région (ii) où P_{tot} augmente de 0.5 à 2.16 ($P_{\text{tot}} = \frac{24x(+2)+12x(+5/2)}{24+12}$). Enfin, la troisième région (iii) correspond au cas où P_{tot} est encore une fois indépendante de D et 2.16. En particulier, dans la région (ii), la polarisation totale ne subit une transition du premier ordre que pour la valeur du paramètre ferriélectrique ($J_{S\sigma} = -1$). Alors qu'il subit une transition du second ordre pour les valeurs des paramètres ($J_{S\sigma} = -1.5$ et -2).

Suivant la même motivation, nous analysons la Fig. IV.19.b pour différentes valeurs d'interaction de couplage d'échange ($J_{SS} = 1, 1.5$ et 2) et pour une valeur de paramètre ferriélectrique fixe $J_{S\sigma} = -1$. À partir de cette figure, nous distinguons aussi trois régions différentes. La première région (i) correspond au cas où la polarisation totale (P_{tot}) reste constante et est égale à 0.5. La deuxième région (ii) où P_{tot} varie entre 0.5 et 2.16. Enfin, la troisième région (iii) où la polarisation totale sature à $P_{\text{sat}} = 2.16$. De plus, dans l'état (ii), indépendamment des valeurs de couplage des interactions d'échange, le système subit une transition du second ordre entre $-8 < D < -1$ et deux transitions de premier ordre entre $-10 < D < -8$ et $-1 < D < -0.5$, pour finalement atteindre une valeur de saturation $P_{\text{sat}}=2.16$.

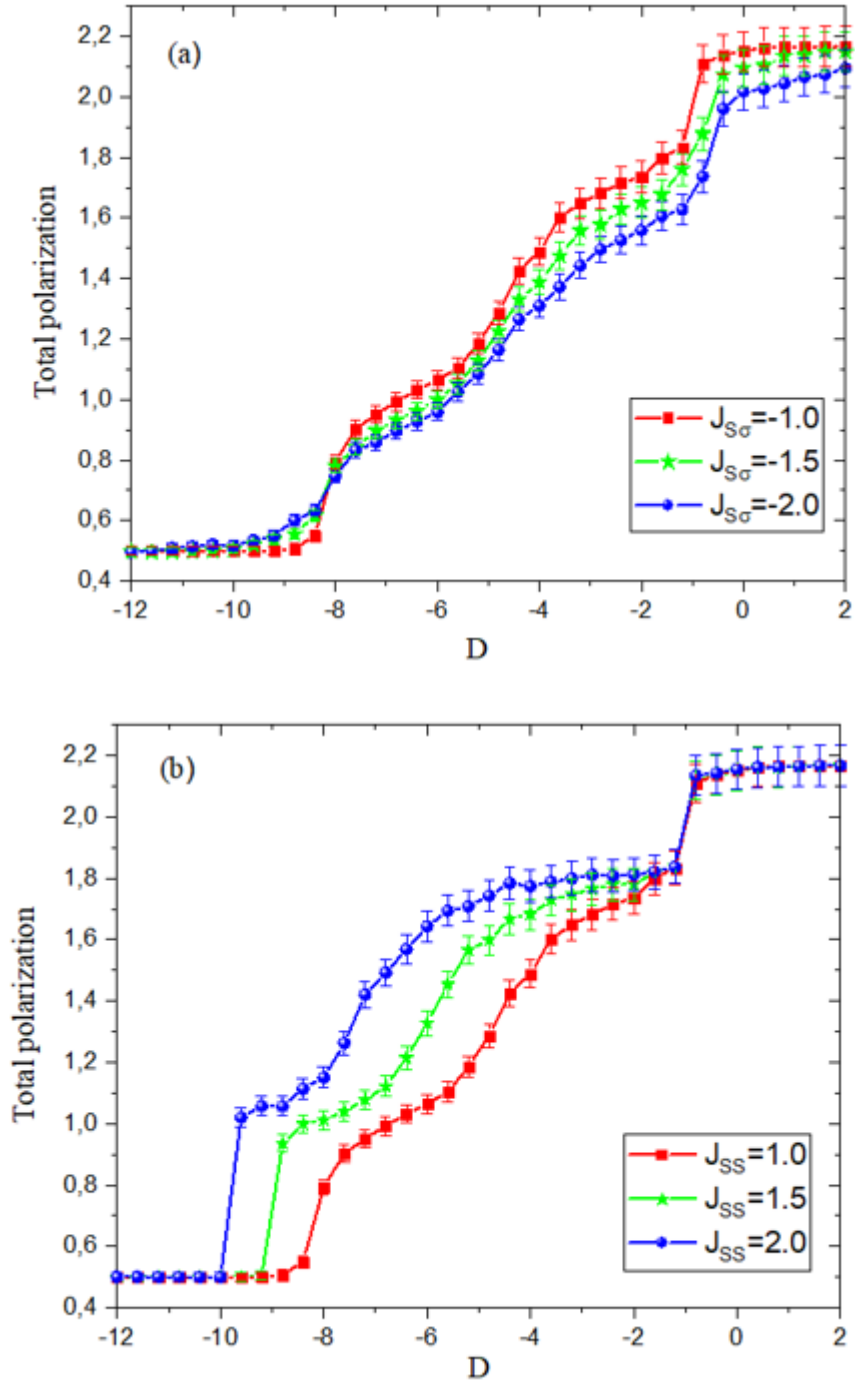


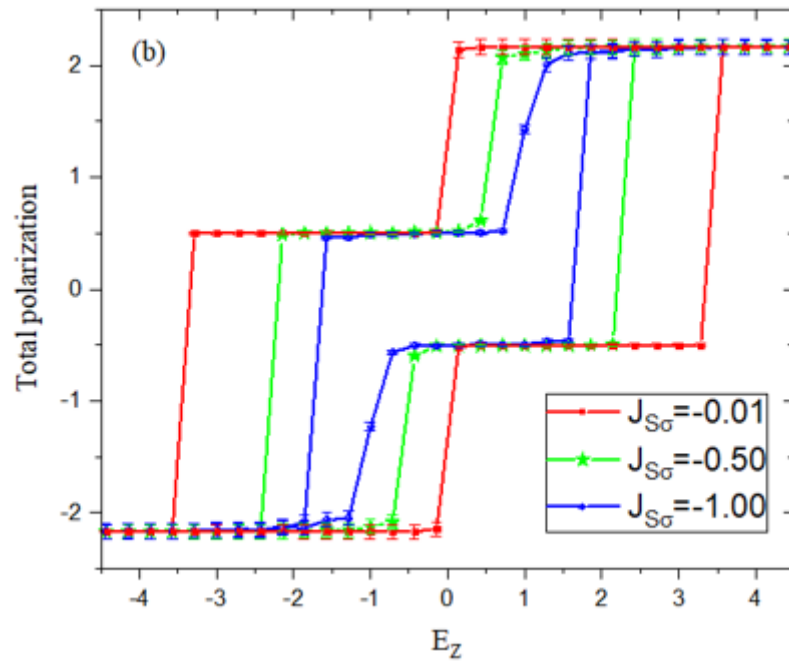
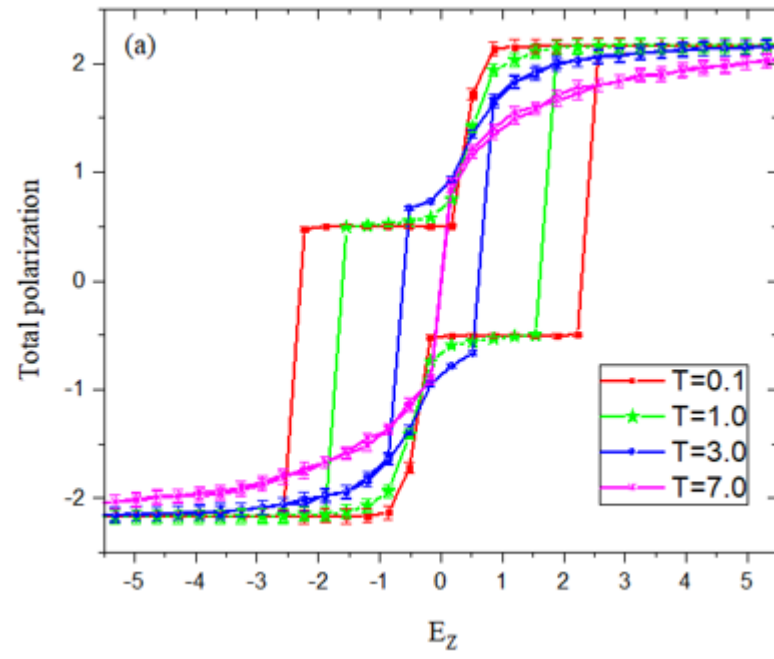
Fig. IV.19: Polarisation totale en fonction du champ cristallin pour $T=0.2$ et $E_Z=3$: (a) $J_{SS}=1$, (b) $J_{S\sigma}=-1$.

Enfin, pour compléter cette étude, nous illustrons sur les Figs. IV.20 (a-c) les cycles d'hystérésis de la nano-structure monocouche de type coronene en l'absence du champ cristallin ($D=0$).

Sur la Fig. IV.20.a, nous présentons les cycles d'hystérésis pour différentes valeurs de température ($T = 0.1, 1, 3$ et 7) et pour des valeurs de paramètres de couplage d'échange fixe $J_{SS}=1$ et $J_{S\sigma}=-0.5$. Sur cette figure, nous remarquons que l'augmentation des valeurs de température fait diminuer le champ coercitif et la surface des boucles. De plus, pour $E_z < 0$: les polarisations partielles sont négatives $P_S = -2$ et $P_\sigma = -5/2$, ce qui conduit à la saturation de la polarisation totale égale à $P_{\text{sat}} = -2.16$ ($P_{\text{tot}} = \frac{24x(-2)+12x(-5/2)}{24+12}$). Tandis que, pour $E_z > 0$: les polarisations partielles sont positives $P_S = +2$ et $P_\sigma = +5/2$, ce qui donne la saturation de polarisation totale égale à $P_{\text{sat}} = +2.16$ ($P_{\text{tot}} = \frac{24x(+2)+12x(+5/2)}{24+12}$). En effet, lors de l'augmentation de la température, la polarisation de saturation totale est retardée et inversement. De plus, le système montre une seule boucle pour ($T= 0.1, 1, 3$) qui disparaît pour $T > 7$. En effet, le système est en phase para-électrique ($P_{\text{tot}} = 0$) pour $T > 7$. Ce comportement peut s'expliquer par la compétition entre le champ électrique longitudinal externe (E_z) et la température (T).

De plus, la Fig. IV.20.b est illustrée pour plusieurs valeurs de paramètres ferri-électriques ($J_{S\sigma} = -0.01, -0.5$ et -1) et pour $J_{SS}=1$ et $T=0.1$. Sur cette figure, le champ coercitif et les boucles de surface décroissent lorsque l'on augmente $|J_{S\sigma}|$.

Enfin, nous examinons sur la Fig. IV.20.c l'effet de l'interaction de couplage d'échange J_{SS} , pour les valeurs de paramètres fixes : $J_{S\sigma}=-0.5$ et $T=0.1$. Cette figure montre l'augmentation du champ coercitif et la surface des boucles lors de l'augmentation de la valeur du paramètre J_{SS} .



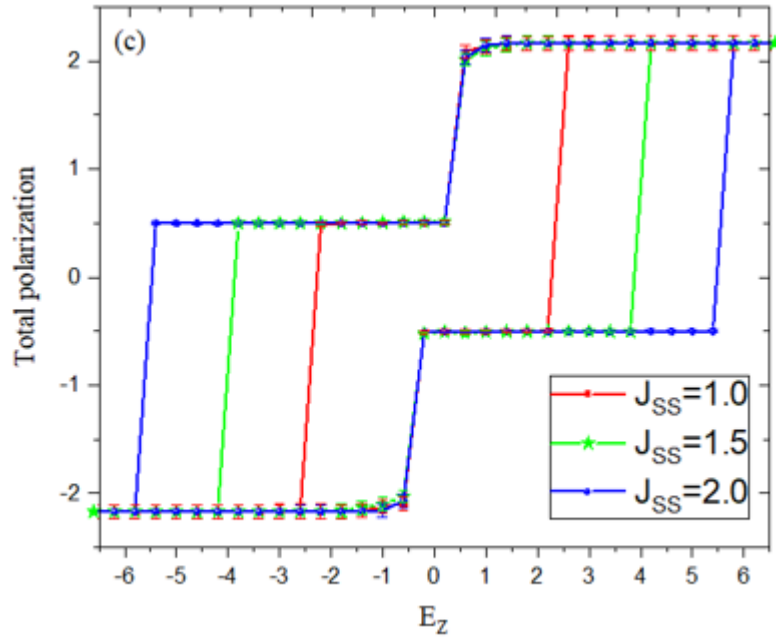


Fig. IV.20: Cycles hystérésis de la nano-structure monocouche de type coronene pour $D=0$:
(a) : $J_{SS}=1$ et $J_{S\sigma}=-0.5$, (b) : $J_{SS}=1$ et $T=0.1$ et (c) : $J_{S\sigma}=-0.5$ et $T=0.1$.

IV.4 Conclusion

Dans ce chapitre, les propriétés magnétiques d'une structure bicouche de graphyne et les propriétés diélectriques des structures monocouches de graphyne et de coronene utilisant les simulations de Monte Carlo ont été étudiées. Nous avons commencé par explorer les diagrammes de phase à l'état fondamental dans différents plans de paramètres physiques. Ces diagrammes de phase ont montré une symétrie parfaite des configurations stables par rapport aux axes $h=0$ et $E_z=0$. Par ailleurs, pour les températures non nulles, l'augmentation des paramètres ferri-magnétique et ferri-électrique en valeur absolue augmente les valeurs de la température de transition. Enfin, les cycles d'hystérésis magnétiques et électriques ont été établis. Ces cycles d'hystérésis dépendent largement de l'interaction de couplage ferri-magnétique et ferri-électrique, de la température et du champ cristallin.

Conclusion générale et perspectives

Motivés par l'importance des nanomatériaux dans les applications de la nanotechnologie, nous nous sommes basés sur les simulations Monte Carlo pour étudier les propriétés magnétiques et diélectriques de différentes nanostructures, notamment le graphène, le graphyne, la stanène, l'ovalène, le naphthalène, le coronène et le borophène. Ces structures ont été traitées dans différentes morphologies (un, deux ou trois plans) et pour différents arrangements de spins. Nous avons commencé par traiter les digrammes de phase à l'état fondamental dans différents plans en variant différents paramètres physiques, pour les structures étudiées. D'autre part, nous avons investigué les comportements thermiques des aimantations, des polarisations, des susceptibilités magnétiques et diélectriques. Ces études ont mis en évidence l'existence des températures de compensation et de transition. En outre, les cycles d'hystérésis magnétiques et électriques ont été examinés. En effet, nous avons étudié les propriétés magnétiques des nanomatériaux de type graphyne, stanène et naphthalène constitués par deux couches magnétiques, séparées par un nombre de couches non magnétiques. L'interaction RKKY entre les deux plans des nanomatériaux a été considérée. Nous avons constaté que l'augmentation du nombre de couches non-magnétiques conduit à une diminution de la valeur de la température de blocage. De plus, les cycles d'hystérésis montrent la diminution des surfaces des boucles et du champ coercitif en augmentant le nombre de couches non-magnétiques.

D'autre part, nous avons déduit les températures de compensation et de transition pour les structures de graphène à trois plans, de borophène cœur-coquille et d'ovalène. Nous avons étudié la variation de la température de compensation en fonction des couplages d'interaction d'échange, du champ magnétique extérieur et de la probabilité de dilution par des atomes non-magnétiques.

Finalement, les propriétés magnétiques d'une structure de graphyne bicouche utilisant les simulations de Monte Carlo ont été étudiées. La température de transition a été déduite pour différentes valeurs du paramètre ferrimagnétique. En effet, l'augmentation de ce paramètre donne une augmentation des valeurs de la température de transition. Les cycles d'hystérésis magnétiques ont été établis et ont montré qu'ils dépendent fortement de l'interaction de couplage ferrimagnétique, de la température et du champ cristallin. Par ailleurs, les effets du champ électrique longitudinal externe et du champ cristallin sur la polarisation, la susceptibilité diélectrique et les cycles d'hystérésis électriques ont été étudiés dans le cas de la structure graphyne monocouche.

Nous envisageons dans l'avenir :

- Compléter la présente étude par la détermination d'autres paramètres qui peuvent influencer l'état du système et les températures de compensation et de transition,
- Étudier d'autres matériaux magnétiques de types 2D et 3D,
- Étudier les plateaux d'aimantation et de polarisation des structures de graphyne, stanène et les structures en nid d'abeilles,
- Utiliser d'autres algorithmes, d'autres modèles et méthodes pour déterminer les propriétés magnétiques, diélectriques et thermodynamiques de différents nanomatériaux.

Références

- [1] L.S. Paixao, Z.Z. Alisultanov and M. S. Reis, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **368** (2014) 374.
- [2] L.A. Bakaleinikov and A. Gordon, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **368** (2014) 281.
- [3] A. Mmadi, K. Rahmani, I. Zorkani, A. Jorio, Superlattices and Microstructures **57** (2013) 27.
- [4] P. Niksiar, M.B. Frank, J. McKittrick and M.M. Porter, Journal of Materials Research and Technology, **8** (2019) 2247.
- [5] I. A. Abrikosov, A.V. Ponomareva, P. Steneteg, S.A. Barannikova and B. Alling, Current Opinion in Solid State and Materials Science, **20** (2016) 85.
- [6] P. Kala and P.M. Pandey, Journal of Manufacturing processes, **17** (2015) 63.
- [7] S. Karpushkin, A. Glebov and K. Kornilov, Materials Today: Proceedings, **11**(2019) 317.
- [8] S. Zriouel, Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone. Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences de Rabat (2016).
- [9] T. Sahdane, Propriétés magnétiques de nanomatériaux : Etude par la méthode Monte Carlo. Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences de Rabat (2017).
- [10] N.D. Mao, T.D. Thanh, N.T. Thuong, A.C. Grillet, N.H. Kim and J.H. Lee, Composites Part B: Engineering, **93** (2016) 280.
- [11] G. Kalkabay, A. Kozlovskiy, M. Zdorovets, D. Borgekov, E. KaSniukov and A. Shumskaya, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **489** (2019) 165436.
- [12] C.J. Lambert, H. Sadeghi and Q.H. Al-Galiby, Comptes Rendus Physique, **17** (2016) 1084.
- [13] J.P.C. Gabriel, Comptes Rendus Physique, **11** (2010) 362.

- [14] S.C. Ray, S. Bhattacharyya, S.L. Wu, D.C. Ling, W.F. Pong, M. Giorcelli, S. Bianco and A. Tagliaferro, *Diamond and Related Materials*, **19** (2010) 553.
- [15] Y. Peng, T. Ohkubo and D.E. Laughlin, *Scripta materialia*, **48** (2003) 937.
- [16] M. Nasrollahzadeh, S.M. Sajadi, M. Sajjadi and Z. Issaabadi, *An Introduction to Green Nanotechnology*, **28** (2019)1.
- [17] A. Fert, P. Grünberg, A. Barthelemy, F. Petroff, W. Zinn, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **140** (1995) 1.
- [18] C. Kittel, « *Physique de l'état Solide* », 7ème édition, Dunod, Paris (1998) 415.
- [19] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statical Physics*, Oxford University press, 2002.
- [20] D. C. Jiles, *Introduction to Magnetism and Magnetic Materials*: Chapman and Hall, 1991.
- [21] B.Z. Mi, C.J. Feng, J.G. Luo and D.Z. Hu, *Superlattices and Microstructures*, **113** (2018) 524.
- [22] R. Thompson, *Environmental magnetism*, Springer, (2012).
- [23] J.M. Coey, *Magnetism and magnetic materials*. Cambridge university press, (2010).
- [24] W. Nolting and A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer, (2009).
- [25] O. Mihaela, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **343** (2013)189.
- [26] H.E. Landsberg, *Advances in geophysics*, Academic Press,**1**(1966).
- [27] J. S. Blundell and K. M. Blundell, *Concepts in Thermal Physics*, Oxford University Press, (2008).
- [28] F. Jedrzejewski, *Modèles Aléatoires et Physique Probabiliste*, Springer, (2009).
- [29] A. Ammari and F. TEBBAA, *Simulation du Modèle Magnétique de Heisenberg par la Dynamique de Spin. Mémoire de Master*, Université Abderrahmane Mira de Bejaia (2016).
- [30] Anderson, P. W., Hasegawa, H. Considerations on double exchange. *Physical Review*, **100** (1955) 675.
- [31] G. Jonker and J. Van Santen, *Physica* **163** (1950) 337.
- [32] J.B. Goodenough, A. Wold, R.J. Arnot, N. Menyuk, *Phys.Rev.* **124** (1961) 373.

- [33] F.M. Mousavi, and R. Farghadan, Physics Letters A, **383** (2019)125991.
- [34] I. Dani, N. Tahiri, H. Ez-Zahraouy and A. Benyoussef, Superlattices and Microstructures, **85** (2015) 894.
- [35] T. Kasuya, Progress of theoretical physics, **16** (1956) 45.
- [36] Y.O Shkurdoda, L.V. Dekhtyaruk, A.G. Basov, A.M. Chornous, Y.M. Shabelnyk, A.P. Kharchenko and T.M. Shabelnyk, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **477** (2019) 88.
- [37] D. P. Landau et K. Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, (2009).
- [38] W. Krauth, Statistical Mechanics Algorithms and Computations, Oxford University Press, (2006).
- [39] C. Gaetan et X. Guyon, Modélisation et statistique spatiales, Springer, (2011).
- [40] M. H. Kalos and P. A. Whitlock, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, (2008).
- [41] R. Y. Rubinstein and D. P. Kroese, Simulation and the Monte Carlo method, Wiley-Interscience, (2008).
- [42] B. Larget, D.L. Simon, Molecular biology and evolution, **16** (1999) 750.
- [43] W. S. Kendall, F. Liang et J. S. Wang, Markov Chain Monte Carlo Innovations and Applications, World Scientific Publishing, (2005).
- [44] W. Krauth, Statistical Mechanics Algorithms and Computations, Oxford University Press, (2006).
- [45] D.M. Saul, M. Wortis and D. Stauffer, Physical Review B, **9** (1974) 4964.
- [46] M. Blume, V.J. Emery and R.B. Griffiths, Physical Review A, **4** (1971) 1071.
- [47] R.J. Baxter, Annals of Physics, **70** (1972) 193.
- [48] F. Bitter, Physical Review, **35** (1930) 1572.
- [49] B. A. Berg, World Scientific, (2004).
- [50] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller and E. Teller, The journal of chemical physics, **21** (1953) 1087.
- [51] I. Zergoug, Modèle d'Ising dilué. Thèse de Doctorat, Université d'Oran des Sciences et de la Technologie (2015).
- [52] M. Hayoun, Ecole "Simulation Numérique en Matière Condensée". (2002).
- [53] U. Wolff, Nuclear Physics B, **300** (1988) 501.
- [54] R.H. Swendsen and J. Wang, Physical review letters, **58** (1987) 86.
- [55] R.G. Edwards and A. D. Sokal, Physical review D, **38** (1988) 2009.

- [56] F. Niedermayer, Physical review letters, **61** (1988) 2026.
- [57] J. Crangle, Solid-State Magnetism, Springer, (2012).
- [58] K. H. J. Buschow and F. R. de Boer, Physics of Magnetism and Magnetic Materials, New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, (2003).
- [59] C. Stefanita, Magnetism Basics and Applications, Springer, (2012).
- [60] J. Strecka, Physica A, **360** (2006) 379.
- [61] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials, Cambridge University Press, (2010).
- [62] Z.Y. Wang, Q. Li, F. Wang, L. Sun, M. Tian and W. Wang, Superlattices and Microstructures, **136** (2019) 106293.
- [63] T. Ouyang, Y. Chen, L. M. Liu, Y. Xie, W. Wei, J. Zhong, Physical Review B, **85** (2012) 235436.
- [64] M. Long, L. Tang, D. Wang, Y. Li, Z. Shuai, ACS Nano, **5** (2011) 2593.
- [65] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili and L. Bahmad. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, **30** (2017) 3189.
- [66] M. Zare, F. Parhizgar and R. Asgari, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **456** (2018) 307.
- [67] T. Kasuya. Progress of theoretical physics, **16** (1956) 45.
- [68] O. Yalçın, R. Erdem and S. Ovunç, Acta Physica Polonica-Series A General Physics, **114** (2008) 835.
- [69] D.L. Peng, K. Sumiyama, S. Yamamuro, T. Hihara and T.J. Konno, Physica Status Solidi (a), **172** (1999) 209.
- [70] F. Magnus, M.E. Brooks-Bartlett, R. Moubah, R.A. Procter, G. Andersson, T.P.A. Hase, S.T. Banks and B. Hjörvarsson, Nature communications, **7** (2016) 11931.
- [71] Y. Li, B. Xu, S. Hu, Y. Li, Q. Li and W. Liu, AIP Advances, **5** (2015) 077168.
- [72] M. Modarresi, A. Kakoei, Y. Mogulkoc and M.R. Roknabadi, Computational Materials Science, **101** (2015) 164.
- [73] S. Barraza-Lopez, Synthetic Metals, **210** (2015) 32.
- [74] W. Xiong, C. Xia, T. Wang, Y. Peng and Y. Jia, The Journal of Physical Chemistry C, **120** (2016) 10622.

- [75] S. Das, S. Mojumder, T. Rakib, M.M. Islam and M. Motalab, *Physica B: Condensed Matter*, **553** (2019) 127.
- [76] J. Gao, J. Zhang, H. Liu, Q. Zhang and J. Zhao, *Nanoscale*, **5** (2013) 9785.
- [77] Z. Zhu, Q. Sun and Y. Jia, *AIP Advances*, **6** (2016) 035012.
- [78] F. Zhu, W. Chen, Y. Xu, C. Gao, D. Guan, C. Liu, D. Qian, S.C. Zhang and J. Jia, *Nature Materials*, **14** (2015) 1020.
- [79] N. B.J. Kanga, S. Insad and L.B. Drissi, *Computational Materials Science*, **155** (2018) 63.
- [80] I. Evazzade, M.R. Roknabadi, T. Morshedloo, M. Modarresi, Y. Mogulkoc and H. Nemati Far, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, **89** (2017) 155.
- [81] A. Abbasi and J.J. Sardroodi, *Applied Surface Science*, **456** (2018) 290.
- [82] R. John and B. Merlin, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **110** (2017) 307.
- [83] N. Dhar and D. Jana, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **115** (2018) 332.
- [84] S. Rachel, M. Ezawa, *Physical Review B*, **89** (2014) 195303.
- [85] B. Mortazavi, O. Rahaman, M. Makaremi, A. Dianat, G. Cuniberti and T. Rabczuk, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **87**(2017) 228.
- [86] M. Modarresi, A. Kakoei, Y. Mogulkoc, M.R. Roknabadi, *Computational Materials Science*, **101**(2015) 164.
- [87] L. Tao, C. Yang, L. Wu, L. Han, Y. Song, S. Wang and P. Lu, *Modern Physics Letters B*, **30** (2016) 1650146.
- [88] M.H. Kang, D. Lee, J. Sung, J. Kim, B.H. Kim and J. Park, *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*, **2** (2018) 55.
- [89] P. Bondavalli, *Graphene and Related Nanomaterials*, (2018) 103.
- [90] A. Abbasi, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, **108** (2019) 34.
- [91] P. Garg, G. Bhattacharyya, P. Bhauriyal and B. Pathak, *Applied Surface Science*, **478** (2019) 946.
- [92] A.I. Khan, R. Paul and S. Subrina, *RSC Advances*, **7** (2017) 50485.

- [93] M. Fadaie, N. Shahtahmassebi, M.R. Roknabad and O. Gulseren, *Physics Letters A*, **382** (2018)180.
- [94] D.X. Xing, C.C. Ren, S.F. Zhang, Y. Feng, X.L. Chen, C.W. Zhang and P.J. Wang, *Superlattices and Microstructures*, **103** (2017)139.
- [95] Y. Xu, B. Yan, H.J. Zhang, J. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan and S.C. Zhang, *Physical review letters*, **111**(2013) 136804.
- [96] X. Zhang and G. Lu, *Carbon*, **108** (2016) 215.
- [97]J. Zhang, X.Y. Lang and Q. Jiang, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, **101**(2018)71.
- [98] B. Zhou, S. Dong, X. Wang and K. Zhang, *Applied Surface Science*, **419** (2017) 484.
- [99] L. Liu, Q. Yang, Z. Wang, H. Ye, X. Chen, X. Fan and G. Zhang, *Applied Surface Science*, **433**(2018)575.
- [100] R. Lora-Serrano, D.J. Garcia, R.P.D. Betancourth, N.S. Amaral, N.S. Camilo, E. Estévez-Rams, L.A. Ortellado G.Z. and P.G. Pagliuso, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **405** (2016) 304.
- [101] J.Strečka, M. Jaščur, M. Hagiwara, Y. Narumi, J. Kuchár, S. Kimura and K. Kindo, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **66** (2005) 1828.
- [102] A. Raj, M. Celnik, R. Shirley, M. Sander, R. Patterson, R. West and M. Kraft, *Combustion and Flame*, **156** (2009) 896.
- [103] A. Raj, M. Sander, V. Janardhanan, and M. Kraft, *Combustion and Flame*, **157** (2010) 523.
- [104] J. Appel, H. Bockhorn and M. Frenklach, *Combustion and flame*, **121** (2000) 122.
- [105] J.P. Hill, W. Jin, A. Kosaka, T. Fukushima, H. Ichihara, T. Shimomura and T. Aida, *Science*, **304** (2004) 1481.
- [106] W. Pisula, A. Menon, M. Stepputat, I. Lieberwirth, U. Kolb, A. Tracz and K. Müllen, *Advanced Materials*, **17** (2005) 684.
- [107] J. Wu, M.D. Watson, L. Zhang, Z. Wang and K. Müllen, *Journal of the American Chemical Society*, **126** (2004) 177.

- [108] J. Happold, H.H. Grotheer and M. Aigner, Rapid Communications in Mass Spectrometry, **21** (2007)1247.
- [109] R. Giniger and A. Amirav, Chemical physics letters, **127** (1986) 387.
- [110] X.L. Wu, R.S. Wang, J. Cheng, G.H. Zhong, X.J. Chen, Y. Gao and Z.B. Huang, Carbon, **136** (2018) 125.
- [111] O.V. Yazyev. Reports on Progress in Physics, **73** (2010) 056501.
- [112] W. Wang, Q. Li, D. Lv, R.J. Liu, Z. Peng, and S. Yang, Carbon, **120** (2017) 313.
- [113] M. Orlita, W. Escoffier, P. Plochocka, B. Raquet and U. Zeitler, Comptes Rendus Physique, **14** (2013)78.
- [114] A. Feraoun and M. Kerouad, Physics Letters A, **382**(2018) 116.
- [115] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva and A. A. Firsov, nature, **438** (2005) 197.
- [116] Y. Zhang, Y-W. Tang, H.L. Stormer and P. Kim, nature, **438** (2005) 201.
- [117] Y. Song, X.M. Li, C. Mackin, X. Zhang, W.J. Fang, T. Palacios, H.W. Zhu, J. Kong, Nano Letters, **15** (2015) 2104.
- [118] F. Kisslinger, C. Ott, C. Heide, E. Kampert, B. Butz, E. Spiecker, S. Shallcross and H.B. Weber, Nature Physics, **11** (2015) 650.
- [119] L.J. Xu, W. Chu, L. Gan, Chemical Engineering Journal, **263** (2015) 435.
- [120] Y. Chen, C.L. Tan, H. Zhang and L.Z. Wang, Chemical Society Reviews, **44** (2015) 2681.
- [121] C. Li, B. Debnath, X. Tan, S. Su, K. Xu, S. Ge, M. R. Neupane, R. K. Lake, Carbon, **138** (2018) 451.
- [122] A. Mir and A. Shukla, Materials & Design, **156** (2018) 62.
- [123] T. Ma, F. Hu, Z. Huang and H.Q. Lin, Applied Physics Letters, **97** (2010) 112504.
- [124] S. Cheng, J. Yu, T. Ma and N. M. R. Peres, Physical Review B, **91** (2015) 075410.
- [125] F. Michael, C. Gonzalez, V. Mujica, M. Marquez, M.A. Ratner, Physical Review B, **76** (2007) 224409.
- [126] T. Kaneyoshi, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **322** (2010) 3410.
- [127] M. Keskin, N. Sarli, B. Deviren, Solid State Communications, **151**(2011) 1025.

- [128] O. Iglesias and A. Labarta, Physical Review B, **63** (2001)184416.
- [129] O. Iglesias, X. Batlle and A. Labarta, Physical Review B, **72** (2005) 212401.
- [130] M. Vasilakaki and K.N. Trohidou, Physical Review B, **79**(2009) 144402.
- [131] Y. Yuksel, E. Aydiner and H. Polat, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **323** (2011) 3168.
- [132] R. Masrour, L. Bahmad, A. Benyoussef, M. Hamedoun and E.K. Hlil, Journal of superconductivity and novel magnetism, **26**(2013) 679.
- [133] L. Bahmad, R. Masrour and A. Benyoussef, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, **25** (2012) 2015.
- [134] W. Jiang, Y.Y. Yang and A.B. Guo, Carbon, **95**(2015) 190.
- [135] W. Jiang and G.Z. Wei, Physica B: Condensed Matter, **362**(2005) 236.
- [136] R. Masrour, L. Bahmad and A. Benyoussef, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **324** (2012) 3991.
- [137] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili and L. Bahmad, Superlattice and Microstructures, **117** (2018) 382.
- [138] C. Ekiz, and R. Erdem. Physics Letters A, **352** (2006) 291.
- [139] E. Machado and G.M. Buendía, Journal of magnetism and magnetic materials, **272** (2004) 249.
- [140] W. Wang, F.L. Xue and M.Z. Wang, Physica B: Condensed Matter, **515** (2017) 104.
- [141] W. Wang, D. Chen, D. Lv, J.-p. Liu, Q. Li, Z. Peng, Journal of Physics and Chemistry of Solids, **108** (2017) 39.
- [142] B. Boechat, R. Filgueiras, C. Cordeiro and N. Branco, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, **304** (2002) 429.
- [143] M. Godoy, V.S. Leite and W. Figueiredo, Physical Review B, **69**(2004) 054428.
- [144] C. Ekiz and R. Erdem, Physics Letters A, **352**(2006) 291.
- [145] D. Lv, F. Wang, R.-j. Liu, Q. Xue, and S.X. Li, Journal of Alloys and Compounds, **701** (2017) 935.
- [146] A. Dakhama and N. Benayad, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **213** (2000) 117.

- [147] I.J.L. Diaz., and N.D.S. Branco, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **468** (2017) 158.
- [148] I.J.L. Diaz and N.S. Branco, *Physica B: Condensed Matter*, **529** (2018) 73.
- [149] A.J. Mannix, X.F. Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers and M.J. Yacaman, *Science*, **350** (2015)1513.
- [150] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen and K. Wu, *Nature Chemistry*, **8** (2016) 563.
- [151] H. R. Jiang, Z. Lu, M.C. Wu, F. Ciucci and T.S. Zhao, *Nano Energy*, **23** (2016) 97.
- [152] L. Shi, T. Zhao, A. Xu and J. Xu, *Science Bulletin*, **61** (2016) 1138.
- [153] L.Z. Liu, S.J. Xiong and X.L. Wu, *Applied Physics Letters*, **109** (2016) 061601.
- [154] X. Zhang, J. Hu, Y. Cheng, H.Y. Yang, Y. Yao and S.A. Yang, *Nanoscale*, **8** (2016) 15340.
- [155] Y.Y. Zhang, J.P. Hu, B. A. Bernevig, X.R. Wang, X.C. Xie and W.M. Liu, *Physical Review Letters*, **102** (2009) 106401.
- [156] J.Y. Li, H.Y. Lv, W.J. Lu, D.F. Shao, R.C. Xiao and Y.P. Sun, *Physics Letters A*, **380** (2016) 3928.
- [157] M.Q. Le, B. Mortazavi and T. Rabczuk, *Nanotechnology*, **27** (2016) 445709.
- [158] J.H. Yuan, N.N. Yu, K.H. Xue and X.S. Miao, *RSC Advances*, **7** (2017) 8654.
- [159] Z.Q. Pang, X. Qian, Y.J. Wei and R.G. Yang, *EPL (Europhysics Letters)*, **116** (2016) 36001.
- [160] D. Lv, Y. Yang, W. Jiang, F. Wang, Z.Y. Gao and M. Tian, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **514** (2019) 319.
- [161] Z.A. Piazza¹, H.S. Hu, W.L. Li, Y.F. Zhao, J. Li and L.S, *Nature Communications*, **5** (2014) 3113.
- [162] K. Shi, W. Jiang, A. Guo, K. Wang and C. Wu, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **500** (2018) 11.
- [163] C.L. Zou, D.Q. Guo, F. Zhang, J. Meng, H.L. Miao and W. Jiang, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, **104** (2018) 138.
- [164] J.P. Santos, F.S. Barreto and D. S. Rosa, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **423** (2017) 175.
- [165] M. Ertaş and A. Yılmaz. *Computational Condensed Matter*, **14** (2018) 1.

- [166] M. Yu, Y. Xu, Q. Mao, F. Li and C. Wang. Journal of Alloys and Compounds, **656** (2016) 362.
- [167] D. Chen, J. Akroyd, S. Mosbach, D. Opalka and M. Kraft, Combustion and Flame, **162** (2015) 486.
- [168] M. Buragohain, A. Pathak., P. Sarre, T. Onaka and I. Sakon, Planetary and Space Science, **133**(2016) 97.
- [169] G.A.N. Connell, R. Allen, and M. Mansuripur, Journal of Applied Physics, **53** (1982) 7759.
- [170] R.E. Camley and J. Barnas, Physical review letters, **63** (1989) 664.
- [171] C. Felser, G.H. Fecher and B. Balke, Angewandte Chemie International Edition, **46**, (2007) 668.
- [172] M.H. Phan and S.C. Yu, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **308** (2007) 325.
- [173] T. Kaneyoshi, Journal of the Physical Society of Japan, **70** (2001) 884.
- [174] O. Canko and E. Albayrak, Physical Review E, **75** (2007) 011116.
- [175] A. Belhaj, A. Jabar, H. Labrim, S. Ziti, L. Bahmad, L. Laânab and A. Benyoussef, Solid State Communications, **226**(2016) 54.
- [176] Y. Yuksel, E. Aydiner, H. Polat, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **323** (2011) 3168.
- [177] W. Zhang, Y.I. Yang and A.B. Guo, Carbon, **95** (2015) 190.
- [178] Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **491** (2019) 165559.
- [179] S.S. Ahmed, L. Bahmad, A. Benyoussef, and A. El Kenz, Superlattices and Microstructures, **109**(2017) 841.
- [180] Y. Nakamura, Physical Review B, **62** (2000) 11742.
- [181] B. Boechat, R. Filgueiras, L. Marins, C. Cordeiro, and N.S. Branco, Modern Physics Letters B, **14** (2000) 749.
- [182] B. Boechat, R.A. Filgueiras, C. Cordeiro and N.S. Branco, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, **304** (2002) 429.
- [183] M. Godoy, V.S. Leite, and W. Figueiredo, Physical Review B, **69** (2004) 054428.
- [184] C. Ekiz, Journal of magnetism and magnetic materials, **307** (2006) 139.

- [185] W. Wang, D. Lv, F. Zhang, J.L. Bi and J. N. Chen, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **385**(2015) 16.
- [186] W. Wang, J.L. Bi, R.J. Liu, X. Chen and J.P. Liu, Superlattices and Microstructures, **98**(2016) 433.
- [187] D. Lv, F. Wang, R.J. Liu, Q. Xue and S. X. Li, Journal of Alloys and Compounds, **701** (2017) 935.
- [188] M. Godoy and W. Figueiredo, Physical Review E, **61** (2000) 218.
- [189] Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, Physica B: Condensed Matter, **564** (2019) 104.
- [190] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, Superlattices and Microstructures, **134** (2019) 106224.
- [191] N. Maaouni, M. Qajjour, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Physica B: Condensed Matter, **566**(2019) 63.
- [192] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, Superlattices and Microstructures, **135** (2019) 106285.
- [193] Y. Benhouria, I. Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja and F. Dujardin, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, **506** (2018) 499.
- [194] Y. Benhouria, I. Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja and F. Dujardin, Superlattices and Microstructures, **75** (2014) 761.
- [195] Z.Y. Wang, W. Wang, Q. Li, M. Tian, Z.Y. Gao and Y. Liu, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, **110** (2019) 127.
- [196] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Physics Letters A, **384** (2020) 126783.
- [197] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Chinese Journal of Physics **67** (2020) 123.
- [198] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, Chinese Journal of Physics, **64** (2020) 295.
- [199] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Solid State Communications, **316-317**(2020) 113944.

- [200] Z. Fadil, N. Maaouni, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, *Phase Transitions*, **93** (2020) 1.
- [201] Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, *Physica B: Condensed Matter*, **578** (2020) 411852.
- [202] W. Jiang, Y.N. Wang, A.B. Guo, Y.Y. Yang and K.L. Shi, *Carbon*, **110** (2016) 41.
- [203] T. Zhang, Q. Xue, S. Zhang and M. Dong, *Nano Today*, **7** (2012), 180.
- [204] H. Sun, S. Mukherjee, Z. Shi, and C. V. Singh, *Carbon*, **148** (2019) 752.
- [205] L. Wei, G.L. Liu, D. Z. Fan and G. Y. Zhang, *Physica B: Condensed Matter*, **545**(2018) 99.
- [206] K. Kakaei, M.D. Esrafil and Ali. Ehsan, *Interface Science and Technology*, **27** (2019) 303.
- [207] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili, and L. Bahmad, *Superlattices and Microstructures*, **117**(2018) 382.
- [208] F. J. Owens, *Solid State Communications*, **250** (2017) 75.
- [209] R. Majidi, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **90** (2017) 189.
- [210] E. Shomali, I. A. Sarsari, F. Tabatabaei, M. Mosaferi and N. Seriani, *Computational Materials Science*, **163** (2019) 315.
- [211] Y. Q. Liu, L. Xu and J. Zhang, *Physics Letters A*, **383** (2019) 1498.
- [212] A. R. Puigdollers, G. Alonso and P. Gamallo, *Carbon*, **96** (2016) 879.
- [213] J. Li, L. C. Xu, Y. Yang, X. Liu, and Z. Yang, *Carbon*, **132**(2018) 632.
- [214] Y. Li, Z. Ma, X. Song, Z. Yang, L. C. Xu, R. Liu, Xi. Li, X. Liu and D. Hu, *Computational Materials Science*, **136** (2017) 1.
- [215] L. Cao, X. Li, C. Jia, G. Liu, Z. Liu and G. Zhou, *Carbon*, **127** (2018) 519.
- [216] B. Liang, H. Bai and Y. Huang, *Computational and Theoretical Chemistry*, **1115**(2017) 261.
- [217] F. Lin, Y. Huang, C. Shi and Y. Li, *Journal of Solid-State Chemistry*, **265** (2018) 402.
- [218] N. Bouhfid, M. Raji, M. Bensalah, A. Qaiss, A. El kacem, *Nano technologies*, (2019) 47.

- [219] L. Wei, G. Liu, Y. Tang and C. Yu, Chinese Journal of Physics, **58**(2019) 212.
- [220] J.M. Wesselinowa and I. Apostolova, Journal of Physics: Condensed Matter **19** (2007) 406235.
- [221] C.L. Yang, M.M. Abd-Elmeguid, H. Micklitz, G. Michels, J.W. Otto, Y. Kong, D.S. Xue and F.S. Li, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **151** (1995) L19.
- [222] Y. Meijie, X. Yong, M. Qiong, L. Fazhan and W. Chengguo, Journal of Alloys and Compounds, **656** (2016) 362.
- [223] W. Jiang, V.C. Lo, B.D. Bai and J. Yang, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, **389** (2010) 2227.
- [224] J. Haruyama, Electronics, **2** (2013) 368.
- [225] L. Jeloica and V. Sidis, Chemical Physics Letters, **300** (1999)157.
- [226] T. Zecho, A. Güttler X. Sha, B. Jackson and J. Küppers, The Journal of Chemical Physics, **117** (2002) 8486.
- [227] X. Sha and B. Jackson, Surface Science, **496** (2002) 318.
- [228] E. Rauls and L. Hornekær, The Astrophysical Journal, **679** (2008) 531.
- [229] S. Cazaux, L. Boschman, N. Rougeau, G. Reitsma, R. Hoekstra, D. Teillet-Billy, S. Morisset, M. Spaans and T. Schlathölter, Scientific Reports, **6** (2016) 1.
- [230] K. Fabian and R. Leonhardt, Earth and Planetary Science Letters, **207** (2010) 84.

Liste des publications

1. **Z. Fadil**, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, Blume-Capel Model of a Borophene Layers Structure with RKKY Interactions: Monte Carlo Simulations, **Ferroelectrics**, (2021). In press.
2. **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, Monte Carlo study of magnetization plateaus of a bi-layer graphyne-like structure, **Integrated Ferroelectrics**, (2021). In press.
3. **Z. Fadil**, N. Maaouni, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Compensation Temperature Behavior in a Nanotube Core-Shell Structure with RKKY Interactions: Monte Carlo Simulations, **Brazilian Journal of Physics**, **50** (2020) 716.
4. **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Polarization and Dielectric Susceptibility of a Monolayer Coronene Like Nano-structure: Monte Carlo study, **Physics Letters A**, **384** (2020) 126783.
5. **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Dielectric properties and compensation behaviors of a monolayer naphthalene-like nanoisland: Monte Carlo Simulations, **Chinese Journal of Physics**, **67** (2020) 123.
6. **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Dilution Effects on Compensation Temperature in borophene core-shell structure: Monte Carlo Simulations, **Solid State Communications**, **316-317** (2020) 113944.
7. **Z. Fadil**, N. Maaouni, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Blume-Capel model of a nano-Stanene like structure with RKKY interactions: Monte Carlo simulations. **Phase Transitions**, **93** (2020) 1.
8. **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar. Magnetic Properties of Naphthalene-Like Nano-structure with RKKY Interactions: Monte Carlo Simulations, **Chinese Journal of Physics**, **64** (2020) 295.
9. **Z. Fadil**, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, Magnetization and susceptibility behaviors in a bi-layer graphyne structure: A Monte Carlo study, **Physica B: Condensed Matter**, **578** (2020) 411852.
10. **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, Dielectric properties of a monolayer nano-graphyne structure: Monte Carlo simulations, **Superlattices and Microstructures**, **135** (2019) 106285.

11. **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, Magnetization and compensation behaviors in a mixed spin (7/2, 1) anti-ferrimagnetic ovalene nano-structure, **Superlattices and Microstructures**, **134** (2019) 106224.
12. **Z. Fadil**, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Blume-Capel model of a bi-layer graphyne structure with RKKY Interactions: Monte Carlo simulations, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **491** (2019) 165559.
13. **Z. Fadil**, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, and W. Ousi Benomar, Dilution effects on compensation temperature in nano-trilayer graphene structure: Monte Carlo study, **Physica B: Condensed Matter**, **564** (2019) 104.
14. M. Qajjour, **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Magnetic properties of a Bi-Layer Borophene Structure with Mixed Spins: Monte Carlo Study, **Journal of Low Temperature Physics**, (2020) 1.
15. M. Qajjour, N. Maaouni, **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Compensation Behaviors in a Tri-layers Nano-Dicoronylene Like-Structure with Ferrimagnetic Mixed Spins (3/2,1): Monte Carlo Study, **Chinese Journal of Physics**, **68** (2020) 930.
16. M. Qajjour, **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Magnetic Properties of a Diluted Bi-layer Borophene Structure: Monte Carlo Study, **Integrated Ferroelectrics**, **212** (2020)120.
17. N. Maaouni, **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Compensation Behavior of an Anti-ferrimagnetic Core-Shell Nanotube Like-Structure: Monte Carlo Study, **Solid State Communications**, **321** (2020) 114047.
18. M. Qajjour, N. Maaouni, **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, W. Ousi Benomar and L. Bahmad, Dilution effect on the compensation temperature in a honeycomb nano-lattice: Monte Carlo study, **Chinese Journal of Physics**, **63** (2020) 36.
19. N. Maaouni, M. Qajjour, **Z. Fadil**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Magnetic and thermal properties of a core-shell borophene structure: Monte Carlo study, **Physica B: Condensed Matter**, **566** (2019) 63.

Ferroelectrics, (2021). In press.

Blume-Capel Model of a Borophene Layers Structure with RKKY Interactions: Monte Carlo Simulations

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

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

Abstract:

In this paper, we study the magnetic properties of a bi-layer borophene structure with RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) interactions. The system is composed by two magnetic layers with mixed spins $\sigma=\pm 3/2, \pm 1/2$ and $S=0, \pm 1$, separated by (L) non-magnetic planes. Firstly, for zero temperature, the ground state phase diagrams are reported and discussed. Secondly, we use the Monte Carlo simulations to explore the RKKY interactions effect on the magnetic properties of the system. The transition temperature increases when decreasing the number (L) of non-magnetic layers. Also, the effect of the exchange coupling interactions on the transition temperature behavior are studied. Finally, we report the effect of different physical parameters on the magnetic hysteresis cycles.

Keywords: Bi-layer Borophene structure; Magnetic properties, Phase diagrams; Monte Carlo simulations; RKKY interactions; Magnetic hysteresis cycles.

Monte Carlo study of magnetization plateaus of a bi-layer graphyne-like structure

Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar

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

Abstract:

Monte Carlo simulation has been used to study the behavior of the magnetization plateaus of the bi-layer graphyne like-structure with spin-2 and spin-5/2 by varying different physical parameters. We start by examining the ground state phase diagrams for zero temperature to establish the stable phases. Besides, we investigate the behavior of the magnetization plateaus for different physical parameters and we explore the critical (h_c) and the saturation (h_s) magnetic fields. Indeed, our Monte Carlo simulations, have been performed to deduce the ground state phase diagrams for $t=0$ and the magnetization plateaus for $t>0$ for the bi-layer graphyne like-structure in different planes of the reduced physical parameters (d , t , r_2 and r_1). The results show that among 30 possible configurations only 18 can be stable. Besides, the system shows multiple magnetization plateaus behaviors for low temperature. The behavior of the critical (h_c) and the saturation (h_s) magnetic fields by varying different physical parameters has been outlined.

Keywords: Bi-layer graphyne-like structure; Phase diagrams; Magnetization plateaus; Monte Carlo simulations; Critical field; Saturation field.



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

Z. Fadil¹  · N. Maaoui¹ · 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 than 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 transition temperature between the ferrimagnetic and paramagnetic phases [19–31].

Moreover, the study of the magnetic properties of nanotubes is of great importance; several studies have been based on nanotubes such as the influence of temperature and electrodeposition potential on the magnetic properties of nickel

✉ Z. Fadil
fadilzakaria604@gmail.com

¹ Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCScl), Faculty of Sciences, Mohammed V University, P.O.Box 1014, Rabat, Morocco



Contents lists available at ScienceDirect

Physics Letters A

www.elsevier.com/locate/pla



Discussion

Polarization and dielectric susceptibility of a monolayer coronene like nano-structure: Monte Carlo study

Z. Fadil*, 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

Article history:

Received 2 March 2020

Received in revised form 5 July 2020

Accepted 30 July 2020

Available online xxxx

Communicated by M. Wu

Keywords:

Monolayer coronene like nano-structure

Dielectric properties

Phase diagrams

Monte Carlo simulations

Polarization

Dielectric susceptibility

Blocking temperature

ABSTRACT

In this paper, we study the dielectric properties of a monolayer coronene like nano-structure with mixed spins ($S = \pm 2$, $\sigma = \pm 5/2$), using Monte Carlo simulations. The ground state phase diagrams in different planes are studied. In addition, we examine the blocking temperature for different exchange coupling interactions. Moreover, we explore the effects of the crystal field on the total polarizations. Finally, the electric hysteresis cycles are given for different values of temperatures and exchange coupling interactions.

© 2020 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Recently, the two-dimensional (2D) materials have been the subject of many scientific investigations. These materials consist of a one layer of atoms and have unique characteristics and important applications [1–5]. Furthermore, several scientific studies have been based on molecules composed by the carbon and the hydrogen atoms named: polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) [6–8], the applications of the polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) structure are used in nanotechnology [9–11]. Concerning hydrogenation reactions, the carbon atoms of a central ring of medium-sized PAHs such as a coronene have similar properties to the carbon atoms of graphite or graphene [12–14]. The equilibrium geometries of the hydrogenated coronene structure [15] or coronene cation [16] involve hydrogenation of the aromatic rings alternating from one side of the aromatic plane of the coronene to another. Moreover, using Monte Carlo simulations, we have investigated the dielectric properties of a monolayer nano-graphyne structure [17], a mixed spins ferroelectric nanowire [18] the double walled ferrielectric nanotubes [19] and the anti-ferroelectric BiFeO₃/YMnO₃ structure [20]. In addition, the magnetic behaviors of materials and nanomaterials were studied using Monte Carlo

simulations [21–28]. These studies give important results such as the transition and compensation temperatures.

The aim of this work is to investigate the thermal and dielectric properties of the coronene like nano-structure, with mixed spins ($S = \pm 2$, $\sigma = \pm 5/2$), using Monte Carlo study under metropolis algorithm [29]. The outline of this paper is as follows: the model and method used are presented in section 2, the ground state phase diagrams ($T = 0$) are discussed in sub-section 3.1 and the Monte Carlo study ($T > 0$) details are reported in sub-section 3.2. Finally, the conclusion is given in section 4.

2. Model and method

In our work, we study the monolayer coronene like nano-structure in the frame of a Blume-Capel Ising model with free boundaries conditions. The total number of the coronene nano-system spins is $N_{\text{tot}} = N_S + N_\sigma = 36$ (see Fig. 1) where $N_S = 12$ and $N_\sigma = 24$ and with mixed spins ($S = \pm 2, \pm 1$ and 0) and ($\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$). Our data were generated with 10^6 Monte Carlo steps per spin, discarding the first 10^5 Monte Carlo steps of the simulations for balancing the system.

The Hamiltonian of the monolayer coronene like nano-structure is given by:

$$\mathcal{H} = -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^Z S_j^Z - J_{S\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} S_k^Z \sigma_l^Z - 2\mu E_Z \left(\sum_i S_i^Z + \sum_j \sigma_j^Z \right)$$

* Corresponding author.

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

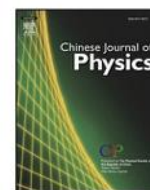
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.126783>

0375-9601/© 2020 Elsevier B.V. All rights reserved.



Contents lists available at ScienceDirect

Chinese Journal of Physics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cjph

Dielectric properties and compensation behaviors of a monolayer naphthalene-like nanoisland: Monte Carlo simulations

Z. Fadil*, 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, Rabat, P.O.Box 1014, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Monolayer naphthalene
Nanoisland
Dielectric properties
Monte Carlo simulations
Dielectric susceptibility
Compensation temperature
Blocking temperature

ABSTRACT

In this paper, we propose a model to study the thermal and dielectric properties of a monolayer naphthalene-like nanoisland. The ferrielectric mixed spin (1, 7/2) Blume-Capel Ising model has been studied, using Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm. The ground state phase diagrams, in the absence of temperature, are investigated. Moreover, we illustrated the thermal and dielectric properties as a function of temperature, for fixed values of the other parameters. On the other hand, we examine the effects of the exchange coupling interactions on the compensation and blocking temperatures. In addition, we explore the effects of crystal and external longitudinal electric fields on total polarizations.

1. Introduction

In recent times, the two-dimensional (2D) materials have been the topic of several scientific investigation. These (2D) materials consist of a single layer of atoms have remarkable features and important applications [1–6]. In addition, numerous scientific studies based on molecules composed of carbon (C) and hydrogen (H) atoms named: polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) [7–9], and due to the (PAHs) important applications in nanotechnology have been established [10–12]. In addition, several experimental studies on (PAHs) type molecules such as ovalene structure of formula $C_{32}H_{14}$ [13,14] have been studied. Moreover, one of the interesting structures in polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) is the naphthalene structure of formula $C_{10}H_8$. The ferromagnetism at room temperature of the naphthalene structure is studied [15]. Also, the Monte Carlo simulations (MCS) have been often used to investigate the magnetic properties of nano-materials [16–21]. Indeed, mixed spin systems are frequently used as a model to study ferrimagnetism. The existence of compensation temperature has been observed in two-dimensional (2D) systems for a different combination of spin [22–36]. In addition, the dielectric properties of a monolayer nano-graphyne structure using Monte Carlo Simulations [37], the thermal and dielectric properties of a mixed spins ferroelectric nanowire [38] the double walled ferrielectric nanotubes [39], and the anti-ferroelectric/ferroelectric $BiFeO_3/YMnO_3$ Ising bilayer [40] are investigated.

In this work, we study a monolayer naphthalene-like nanoisland, with mixed spins (1, 7/2) [41,42]. The originality of this work is the investigation of the thermal and dielectric properties of this structure using Monte Carlo simulations technique under metropolis algorithm. The outline of this paper is as follows: the model and method used are presented in section 2, the ground state phase diagrams are discussed in sub-section 3.1 and the Monte Carlo results are reported in sub-section 3.2. Finally, the conclusion is given in section 4.

* Corresponding author.

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

<https://doi.org/10.1016/j.cjph.2020.06.011>

Received 8 December 2019; Received in revised form 28 May 2020; Accepted 22 June 2020

Available online 25 June 2020

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



Dilution effects on compensation temperature in borophene core-shell structure: Monte Carlo simulations

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 1014, Mohammed V University in Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Communicated by F. Peeters

Keywords:

Borophene core-shell structure
Magnetic properties
Phase diagrams
Monte Carlo simulations
Compensation temperature
Dilution concentration
Magnetic hysteresis cycles

ABSTRACT

In this paper, we study the magnetic properties of a diluted core-shell borophene structure. The system is composed by the mixed spins $\sigma = \pm 1, 0$ (in the core) and $S = \pm 3/2, \pm 1/2$ (in the shell). Indeed, the originality of this work is to introduce the non-magnetic atoms in the shell part of the borophene monolayer system and study their effects on the magnetic properties behavior. Firstly, the ground state phase diagrams for different parameters are reported and discussed. Numerically, we use the Monte Carlo simulations (MCS) to study the effect of the dilution concentration on the magnetizations and susceptibilities of the system. Moreover, the compensation and transition temperatures decrease when increasing the dilution concentration parameter. Furthermore, the effect of the dilution concentration on the total magnetization versus the crystal field is discussed. Finally, the effects of the dilution concentration and the temperature on the hysteresis cycles are investigated.

1. Introduction

Recently, the two-dimensional materials have attracted the attention of many researchers. These materials have interesting applications. Indeed, several materials have been studied for this purpose, such as graphene and black phosphorus [1–6]. The Borophene is one of the new 2D materials, this material has been experimentally synthesized on a silver surface [7,8]. This structure has several applications in batteries [9–12]. Since boron is close to carbon in a periodic table, the chemical properties of borophene structure are similar to those of graphene [13]. The magnetic and electronic properties [14] and the mechanical properties [15–18] of the borophene structure have been studied. The borophene structure B36 is very stable, it has been studied experimentally and theoretically [19]. Furthermore, the magnetic and thermodynamic properties, the susceptibilities and the hysteresis loops of a borophene structure have also been investigated [20,21]. Besides, the Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm is used to study the magnetizations and magnetic susceptibilities behaviors in a bi-layer graphyne structure [22] and is also used to the study the polarizations and dielectric susceptibilities behaviors of a monolayer nano-graphyne structure [23].

On the other hand, the presence of a compensation temperature in ferrimagnetic system, which corresponds to a zero value of total magnetization, can take place under specific conditions [24–32].

Additionally, the effect of the dilution on magnetic properties behavior is very important [33–38]. Moreover, the mixed spins [39–44] and the triangular lattice [45,46] systems are often used as a model to study the ferrimagnetism of several systems.

In this work, we study a system constituted by a core-shell borophene structure, with mixed integer ($\sigma = \pm 1, 0$) and half-integer ($S = \pm 3/2, \pm 1/2$) spins, using Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm. The originality of this work is to take into account the dilution in the shell part of the studied system. The paper is organized as follows: the model and method are given in section 2, the ground state phase diagrams are presented and discussed in sub-section 3.1 and the Monte Carlo simulations (MCS) details in sub-section 3.2. Finally, section 4 is devoted to the conclusion.

2. Model and method

The borophene core-shell structure is studied with free boundaries conditions. The system is composed with mixed spins 1 ($\sigma = \pm 1, 0$) and $3/2$ ($S = \pm 3/2, \pm 1/2$). The total number of the system spins is $N = N_\sigma + N_S = 210$ with $N_\sigma = 36$ (in core) and $N_S = 174$ (in shell), the shell part is randomly diluted with non-magnetic atoms (see Fig. 1). Our data were generated with 10^6 Monte Carlo steps per spin, discarding the first 10^5 Monte Carlo steps of the simulations to reach the equilibrium of the system. We applied the Jackknife method [47] to calculate the error

^{*} Corresponding author.

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

<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2020.113944>

Received 6 May 2019; Received in revised form 3 April 2020; Accepted 23 April 2020

Available online 30 April 2020

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



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 (LaMCScI), 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

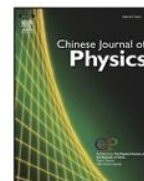
CONTACT Z. Fadil  fadilzakaria604@gmail.com

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



Contents lists available at ScienceDirect

Chinese Journal of Physics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cjph

Magnetic properties of naphthalene-like nano-structure with RKKY interactions: Monte Carlo simulations



Z. Fadil*, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar

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

ARTICLE INFO

Keywords:

Naphthalene-Like nano-structure
Magnetic properties
Phase diagrams
Monte Carlo simulations
RKKY interactions
Magnetic hysteresis cycles

ABSTRACT

In this paper, we have studied the magnetic properties of a bi-layer naphthalene-like nano-structure with RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) interactions, using Monte Carlo simulations. The system consists of two naphthalene-like magnetic planes, with mixed spins $\sigma = 7/2$ and $S = 1$, separated by L non-magnetic layers. In the first part of this study, the ground state phase diagrams for zero temperature are reported and discussed. In the second part, we investigate the effect of the RKKY interactions on the magnetizations and susceptibilities of the system, for non-zero temperature values. It is found that the value of the blocking temperature decreases when increasing the number of non-magnetic layers. Furthermore, the effect of the ferrimagnetic parameter (J_{So}) on the blocking temperature behavior has been investigated. Finally, the effect of different physical parameters, namely the number of non-magnetic layers, the ferrimagnetic parameter, the crystal field and the temperature, on the magnetic hysteresis cycles are illustrated.

1. Introduction

Recently, two-dimensional (2D) materials have been the subject of several scientific studies. These materials consist of a single layer of atoms have interesting features and important applications such structures of graphene, graphyne and black phosphorus [1–6]. Besides, many scientific studies have been based on molecules composed of carbon and hydrogen atoms called: polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) [7–9], and thanks to (PAHs) important applications in nanotechnology have been realized [10–12]. In addition, several experimental studies have been conducted on (HAPs) type molecules such as ovalene structure, the distinction of gaseous soot precursor molecules and soot precursor particles by photoionization mass spectrometry [13], the effects of solvent on the pure life of ovalene pure radiation [14] have been studied. Furthermore, one of the interesting structures in (PAH) is the naphthalene structure of formula C_{10}H_8 . The ferromagnetism at room temperature of this structure is studied [15]. On the other hand, the magnetic properties were studied for different structure using the Monte Carlo simulations and this leads to interesting results, namely for a diluted ferrimagnetic materials structure [16], Lieb Nanolattice spin [17], a bilayer and trilayer nano-graphene structure [18,19], magnetization and compensation behaviors of ovalene nano-structure [20] and magnetic and thermal properties of a core-shell borophene structure [21].

In the present work, we study a system constituted by a magnetic bi-layer naphthalene-like nano-structure, with mixed $\sigma = 7/2$ and $S = 1$ spins [22,23], separated by a non-magnetic layers. The exchange coupling interactions RKKY (Ruderman–Kittel–Kasuya–Yoshida) [24–27] is between the spin atoms of plane A and plane B. The studied system is investigated using the Monte Carlo

* Corresponding author.

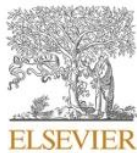
E-mail address: fadilzakaria604@gmail.com (Z. Fadil).

<https://doi.org/10.1016/j.cjph.2020.01.012>

Received 2 December 2019; Received in revised form 20 December 2019; Accepted 22 January 2020

Available online 13 February 2020

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



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 (LaMCSi), 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.



Contents lists available at ScienceDirect

Superlattices and Microstructures

journal homepage: www.elsevier.com/locate/superlattices

Dielectric properties of a monolayer nano-graphyne structure: Monte Carlo simulations

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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

Monolayer nano-graphyne structure
Dielectric properties
Phase diagrams
Monte Carlo simulations
Polarization
Dielectric susceptibility
Blocking temperature
Hysteresis cycles

ABSTRACT

In this paper, the dielectric properties of a monolayer nano-graphyne structure, with mixed spins $\sigma = 7/2$ and $S = 1$, have been studied, using Monte Carlo simulations. Firstly, the ground state phase diagrams for a zero temperature value are reported and discussed. Secondly, the dielectric properties of the studied system for a non-zero temperature are examined. The effects of the temperature, the external longitudinal electric and crystal fields on polarization, dielectric susceptibility and hysteresis cycles have been investigated.

1. Introduction

Because of their ability to form a wide variety of hybridizations, carbon atoms form a variety of structural allotropes of different sizes, which gives a fullerene of zero dimension, a one-dimensional carbon nanotube [1] and two-dimensional graphene [2]. Such structures are considered among the allotropes having aroused considerable interest, because of their important optical and electronic properties [3]. Theoretical studies have shown that graphyne has unique electronic and thermal characteristics [4,5]. However, composed by sp and sp^2 hybridized carbon atoms, graphyne has different structures and was largely studied [6–15]. Indeed, graphyne can be classified according to its metal band structure such as R -graphyne [7], as α - β , and δ -graphynes in semi-metal [8–11], and as γ -graphyne and γ -graphdiyne in a semiconductor [16,17]. Interestingly, the graphdiyne (graphyne-2 films) had been synthesized successfully on the surface of copper [18]. Recently, using the Monte Carlo simulation, researches have yielded interesting results by studying the magnetic properties of different structures, namely a core-shell borophene structure [19], a Lieb nanolattice spin [20] and a bilayer and trilayer graphene structure [21,22]. Besides, the dielectric properties of a mixed spins ferroelectric nanowire in the frame of the Blume–Capel Ising [23], the anti-ferroelectric/ferroelectric BiFeO₃/YMnO₃ bilayer in the external electric field [24] and the double walled ferrielectric nanotubes [25] are investigated.

In this work, we study a monolayer nano-graphyne structure, with a mixed half-integer $\sigma = 7/2$ and an integer $S = 1$ spins. The originality of this work lies in the investigation of the thermodynamic and dielectric properties of this structure, using Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm. The outline of this paper is 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.

^{*} Corresponding author.

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

<https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106285>

Received 2 July 2019; Received in revised form 12 September 2019; Accepted 28 September 2019

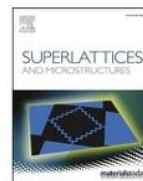
Available online 30 September 2019

0749-6036/© 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.



Contents lists available at ScienceDirect

Superlattices and Microstructures

journal homepage: www.elsevier.com/locate/superlattices

Magnetization and compensation behaviors in a mixed spins (7/2, 1) anti-ferrimagnetic ovalene nano-structure

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 1014, Mohammed V University in Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Magnetic ovalene nano-structure
Monte Carlo simulations
Compensation temperature
Exchange coupling interaction
Phase diagrams
Hysteresis cycles

ABSTRACT

The magnetic properties of a mixed spins (7/2, 1) anti-ferrimagnetic ovalene nano-structure have been investigated using Monte Carlo simulations. We start by discussing the ground state phase diagrams corresponding to several physical parameters. Then the effects of the crystal field, the exchange coupling interactions and the external magnetic field on the magnetizations, the compensation temperatures and the hysteresis behaviors have been studied. Interesting results have been found, especially, the appearance of two compensation temperatures and their behaviors according to different physical parameters.

1. Introduction

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are molecules consisting of carbon and hydrogen atoms such as Coronene $C_{24}H_{12}$, Corannulene $C_{20}H_{10}$ and Pyrene $C_{16}H_{10}$. The (PAHs) have been the interest of several scientific research [1–3]. Applications of these molecules in nanotechnology have been made [4–6]. The ovalene is a PAH consisting of ten fused benzene rings of the chemical formula $C_{32}H_{14}$. The behavior at the fusion of the ovalene organic nano-structure using molecular dynamics simulations have been discussed [7]. Calculations by the functional density method (DFT) on ovalenes containing deuterium have been made [8]. In recent years the interest for ferrimagnets has increased, these systems present important technological applications [9–12]. Indeed, several experimental studies were realized on the ovalene structure, the effects of solvent on the pure life of ovalene pure radiation [13], the distinction of gaseous soot precursor molecules and soot precursor particles by photoionization mass spectrometry have been studied [14].

Since the discovery of ferrimagnetism, many theoretical models have been provided to study their magnetic properties [15–21]. The ferromagnetic properties of nano-systems have been studied using different methods such as the mean field approximation (MFA) [22] and the effective field theory (EFT) [23,24]. Furthermore, the Monte Carlo simulations (MCS) have been widely used to calculate the magnetic properties of nano-materials [25–32]. On the other hand, the mixed spin systems are often used as a model to study ferrimagnetism. The existence of temperature compensation has been verified in two-dimensional systems for a different combination of spin [33–44]. The possibility of two compensation points in a ferromagnetic Ising system decorated [45]. In addition, the magnetic properties of the similar nano-structure have been studied by Monte Carlo simulation leading to a several interesting results, namely for a spin Lieb Nanolattice [46], for a bilayer and trilayer nano-graphene structure [47,48] and for a Kekulene structure bilayers separated by non-magnetic layers with RKKY interactions [49].

^{*} Corresponding author.

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

<https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106224>

Received 29 March 2019; Received in revised form 9 July 2019; Accepted 11 August 2019

Available online 12 August 2019

0749-6036/© 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.



Invited Review

Blume-Capel model of a bi-layer graphyne structure with RKKY Interactions: Monte Carlo simulations



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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

Bi-layer graphyne structure
Magnetic properties
Phase diagrams
Monte Carlo simulations
RKKY interactions
Magnetic hysteresis cycles

ABSTRACT

In this paper, we study the magnetic properties of a bi-layer graphyne structure with RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) interaction. The system is composed by two magnetic layers with mixed spins $\sigma = 3/2$ and $S = 1$, separated by (L) non-magnetic ones. Firstly, the ground state phase diagrams are reported and discussed. Then we use the Monte Carlo simulations in order to determine the effect of the RKKY interaction on the system magnetic properties. We find that the transition temperature increases when decreasing the number of non-magnetic layers. This result is confirmed by the displacement of the peak of susceptibility towards the high temperatures. Furthermore, the variation of the total magnetization versus the crystal field remains independent of the parameter L when this one is greater than or equal to three. Besides, the hysteresis loop stays invariable for $L \geq 2$.

1. Introduction

Recently, nanotechnology has become one of the richest areas in scientific research and this is due to its innovative properties that have allowed multiple applications. Magnetic nanoparticles are the basis of the latest scientific discoveries [1–5]. Similar to the graphene structure, the graphyne is one of the two-dimensional materials, composed of carbon atoms bonded by sp^2 bonds which, for the time being, has not been synthesized in sufficient quantity to be studied but it was predicted through computer models. Graphyne structure is more flexible than that of graphene and this gives the possibility to build nanotubes. Theoretical researches have shown that graphyne structure exhibits a good thermal [6] and electronic properties [7]. Several works based on different calculation technics to find the behavior of the nano-materials [8–24], particularly the effective field theory [25–28], the mean-field [29,30] and the renormalization group approximations [31]. Besides, the graphyne structure was studied by a numerical method using density functional theory [32] and Monte Carlo simulation [33].

In this work, we consider a system constituted by a magnetic bi-layer graphyne structure, with mixed spins $\sigma = 3/2$ and $S = 1$, separated by non-magnetic planes. The interaction between the spins of each layer is governed by the exchange coupling RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) [12,34,35]. To numerically investigate this system, we use the Monte Carlo technique under the Metropolis algorithm. The paper is organized as follows: the model and method are

given in Section 2, the ground state phase diagrams are presented and discussed in Section 3.1 and the simulation details in Section 3.2. Finally, Section 4 is reserved for conclusion.

2. Model and method

The bi-layer mixed graphyne structure is studied with free boundaries conditions. The system is composed by two planes A and B with mixed spins $\sigma = 3/2$ and $S = 1$, separated by a number (L) of non-magnetic layers. Such a compound contains $N_S = N_\sigma = 108$ atoms, (see Fig. 1). Several algorithms have been developed to generate random sequence statistics, but none of them has reached the popularity of the algorithm of Metropolis et al. [36]. We have generated a Monte Carlo calculation of 10^5 steps per spin. To reach equilibrium, we eliminate the first 10^4 steps of the simulations. We have averaged over each parameter taking account the Jackknife method [37,38].

The Hamiltonian of the studied system is given by:

$$H = -J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_{\sigma S}^A \sum_{i \in A} \sigma_i \sum_{j \in B} S_j - J_{\sigma S}^B \sum_{i \in A} S_i \sum_{j \in B} \sigma_j - H \left(\sum_i \sigma_i + \sum_j S_j \right) - D \left(\sum_i \sigma_i^2 + \sum_j S_j^2 \right) \quad (1)$$

where $J_{\sigma\sigma}$ is the magnetic exchange coupling between atoms with spins σ and S in the same plane ($J_{\sigma\sigma} < 0$), belonging the two magnetic

* Corresponding authors.

E-mail addresses: fadilzakaria604@gmail.com (Z. Fadil), lahou2020@gmail.com (L. Bahmad).<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165559>

Received 21 February 2019; Received in revised form 16 May 2019; Accepted 9 July 2019

Available online 10 July 2019

0304-8853/ © 2019 Elsevier B.V. All rights reserved.



Dilution effects on compensation temperature in nano-trilayer graphene structure: Monte Carlo study



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

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

ARTICLE INFO

Keywords:
Nano-trilayer
Graphene
Dilution probability
Monte Carlo simulations
Compensation temperature
Non-equivalent planes

ABSTRACT

In this paper, we study the magnetic properties of a diluted trilayer graphene structure with non-equivalent planes. The spins of the planes forming the trilayer systems ABA and BAB are $S = 1$ (for the plane A) and $\sigma = 3/2$ (for the plane B). The ground state phase diagrams are reported and discussed. Besides, we provide the variation of the total magnetizations versus reduced temperature and reduced crystal field for several values of the coupling exchange interactions and the dilution probability, using Monte Carlo simulations. The two systems provide opposite results regarding the compensation temperature T_{comp} behavior as a function of dilution probability p . Indeed, the compensation temperature increases when decreasing the dilution probability for ABA system. While for the BAB system, T_{comp} increases when increasing p .

1. Introduction

The nano-materials structures have applications in many areas such as spintronic [1]. Recently, the study of graphene structures has attracted considerable attentions [2,3]. The graphene is a two-dimensional crystalline materials network consisting of carbon atoms contained in a honeycomb structure. Monolayer, bilayer and multilayer samples of such a structure have been obtained [4–6]. Furthermore, the nano-graphene presents many performances, such as electrical energy storage, high mechanical stability, and low intensity. Indeed, the unique graphene structure of benzene's six-membered rings allows it to become one of the lightest and thinnest two-dimensional materials. New scientific advances have extended the scope of graphene, such as solar cells [7], linear magneto resistance [8], chemical engineering [9], environmental sciences [10], etc. Besides, the presence of impurity or vacancy in nano-graphene structures affects largely the physical properties the study system, namely its thermal conductivity [11]. Recently, several researchers have been interested to study the physical properties of multilayers graphene and their applications in different fields (see Ref. [12] and references therein). Furthermore, the ferromagnetism in graphene is considered in Ref. [13]. More recently, the zigzag edge effect on magnetic properties on graphene is investigated [14].

A many theoretical magnetic behavior works on graphene-type materials have been realized by various methods. Indeed, several

studies have been made on the ferromagnetic properties of nano-systems, by using different methods such as the mean-field approximation (MFA) [15] and the effective field theory (EFT) [16,17]. The Monte Carlo simulations have been also used to calculate the magnetic properties of nano-graphene lattice [18–25] and nano-graphene bi-layer structure with non-equivalent planes [26,27]. On the other hand, the presence of a compensation temperature is possible in these magnetic systems when the total magnetization is zero [28–36]. In addition, to study the effect of dilution on magnetic properties is very important, because pure systems are rare in nature [37,38].

In the present work, we consider a trilayer graphene structures with non-equivalent planes with two types of atoms (A and B). Each layer is composed of only one type of atom. The studied systems are composed by ABA and BAB structures. We also consider the presence of site dilution in B plane. Calculations are performed using Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm. The paper is organized as follows: we present the Hamiltonian for the studied system in Sec.2. The ground state phase diagrams are given in Sec.3.1. Finally, the simulation details are discussed in Sec.3.2.

2. Model and method

We consider a trilayer graphene structure with non-equivalent planes to study the magnetic properties. Each layer is composed exclusively of either type-A or type-B atoms: A (spin $S = 1$) and B (spin

* Corresponding author.

** Corresponding author.

E-mail addresses: fadilzakaria604@gmail.com (Z. Fadil), bahmad@fsr.ac.ma (L. Bahmad).

<https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.03.006>

Received 11 January 2019; Received in revised form 28 February 2019; Accepted 8 March 2019

Available online 09 March 2019

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



Magnetic Properties of a Bi-Layer Borophene Structure with Mixed Spins: Monte Carlo Study

M. Qajjour¹ · Z. Fadil¹ · A. Mhirech¹ · B. Kabouchi¹ · L. Bahmad¹ · W. Ousi Benomar¹

Received: 27 April 2020 / Accepted: 26 October 2020
© Springer Science+Business Media, LLC, part of Springer Nature 2020

Abstract

Our aim of this work is to study the magnetic properties of a bi-layer borophene structure, using Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm. Such a system is formed by two layers. The first one contains 126 atoms with spin $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ and 84 atoms with spins $S = \pm 1, 0$ while the second one contains 84 atoms with spin $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ and 126 atoms with spins $S = \pm 1, 0$. We establish, in various planes, the ground-state phase diagrams. Furthermore, we present the thermal variation of the total magnetization and total susceptibility for several values of exchange coupling interactions and crystal field. It is found that the increase in both exchange coupling interactions leads to an almost linear increase in transition temperature in one hand and, on the other hand, to a decrease in the corresponding crystal field transition.

Keywords Borophene structure · Monte carlo simulations · Magnetization · Magnetic susceptibility · Critical temperature · Ferrimagnetic exchange coupling interaction

1 Introduction

Recently, the scientific community and the majority of researchers in the field of physics of materials are oriented and focused their research on the study of nanomaterials [1–5]. Among these researchers, there are those who are very interested in studying the magnetic properties of the nanomaterials, because they have a major role in different research fields, such as, in the storage of information, in spintronics [6–8] and electric machines [9, 10]. To investigate the theoretical study and simulate these nanomaterials, the researchers have used several approaches and methods such

✉ M. Qajjour
qajjour@gmail.com

¹ Laboratoire de la Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSi), Faculty of Sciences, Mohammed V University, P. O. Box 1014, Rabat, Morocco



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. Maaouni^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 (LaMCSi), 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.

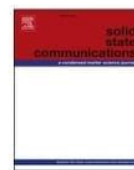
E-mail address: qajjour@gmail.com (M. Qajjour).

<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.



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 (LaMCScI), Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, P.O. Box 1014, Morocco

ARTICLE INFO

Communicated by: Asgari Reza

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 $\sigma = 1$ 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, inter 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, Canko 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 $\sigma = 1$ (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.

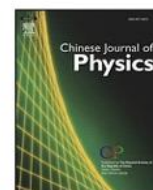
E-mail address: maaoouni.n@gmail.com (N. Maaoui).

<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.



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 (LaMCSi), 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.



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



N. Maaoui*, 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 1014, Mohammed V University of Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Borophene structure
Magnetic properties
Monte Carlo simulations
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 fields 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 Ising 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 ($6.6 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$) [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_{30} , B_{35} 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: maaoui.n@gmail.com (N. Maaoui).

<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.



Magnetic Properties of a Diluted Bi-Layer Borophene Structure: Monte Carlo Study

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

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

ABSTRACT

Using Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm, we study the dilution effect on the magnetic properties in a bi-layer borophene structure. The system is formed by two layers, where each layer contains two sub-lattices of 210 atoms (with mixed spins $\sigma = 3/2$ and $S = 5/2$). The ground-state phase diagrams are presented in different physical parameter planes. Besides, the thermal variation of the total and partial magnetizations and susceptibilities are reported by applying Monte Carlo method. Furthermore, the dilution effect of the S spins and/or σ spins is investigated. It is found that the dilution affects the magnetizations and the hysteresis loops of the studied system strongly.

ARTICLE HISTORY

Received 3 May 2020

Accepted 21 August 2020

KEYWORDS

Bi-layer borophene structure; Monte Carlo simulations; dilution probability; hysteresis loops; magnetization; transitional temperature

1. Introduction

Recently, many researchers in the physics of condensed matter have given enough interest to study several properties of nanostructures experimentally [1–4] and theoretically [5–9]. On the other hand, the investigation of the magnetic and thermodynamic properties of nanostructures has been the object of several kinds of research such as the study of structures with one layer [10,11], bi-layers [12,13], three-layers [14–16] and multi-layers [17–20]. In addition, to investigate several properties of nanostructures, the geometry can take a simple form or core-shell form [21–23].

We study the magnetic properties of a bi-layer borophene structure due to the fact that in the last years, the scientific community gave a lot of importance to this material forasmuch the properties which possessed. The borophene is a two-dimensional structure of boron-containing seven units, and each unit is formed by 36 atoms with a hexagonal hole in the middle of the unit. The borophene has many applications such as spintronics [24], the researchers predict that the borophene may be entirely metallic [25].

Many other research works have been developed to reveal all the characteristics of the borophene experimentally and theoretically. In chemistry, Jiang et al. [26] have investigated a new application of borophene as an anode material for lithium-ion batteries. The authors concluded that the borophene, as a promising anode material for lithium-ion batteries, has good potential in terms of energy density and power density.