

THESE

N° d'ordre = 3683

En vue de l'obtention du : **DOCTORAT**

STRUCUTURE DE RECHERCHE : Laboratoire de Physique des Hautes Énergies,
Modélisation et Simulation (LPHE M-S)

DISCIPLINE : Physique

SPÉCIALITÉ : Physique des matériaux

Présentée et soutenue le : 24/09/2022 par :

Badreddine NMAILA

Contribution à l'étude des nanostructures magnétiques types nanofils et nanotubes à structure hexagonale : Méthode de Monte-Carlo

JURY

Larbi SETTI	PES	Université Abdelmalek Essaadi, Faculté Polydisciplinaire-Larache	Président
Mohammed TAIBI	PH	Université Hassan II-Casablanca, Faculté des sciences-Ain Chock	Rapporteur / Examineur
Omkaltoume EL FATNI	PH	Université Mohammed V, Faculté des sciences-Rabat	Rapporteur / Examineur
Rachid AHL LAAMARA	PH	Université Mohammed V, Faculté des sciences- Rabat	Rapporteur / Examineur
Mohcine DRISSI EL BOUZAI	PA	Ecole Nationale d'Architecture de Tétouane	Invité
Khadija HTOUTOU	PH	CRMEF Fès-Meknès	Co-Directrice de thèse
Lalla Btissam DRISSI	PES	Université Mohammed V, Faculté des sciences- Rabat	Directrice de thèse

Année Universitaire : 2021 / 2022

Dédicace

*À la mémoire de mon grand-père
Puisse Dieu l'accueillir dans son infinie Miséricorde
À mes très chers parents
À ma très chère femme Sanaa
À ma très chère sœur Sanaa
À mes très chers frères
À mon oncle Driss et sa famille
À mon oncle Hammadi et sa famille
À Monsieur Aziz El Haggi et sa famille
À tous ceux qui m'ont aidée
À tous ceux qui m'ont soutenue de près ou de loin
À tous ceux qui ont cru en moi
À tous ceux qui m'ont fait confiance
À tous ceux qui ont supporté mes questions incessantes
Je vous dédie ce Manuscrit avec toute la grâce du monde*

Remerciement

Les travaux présentés dans cette thèse ont été dirigé au sein du Laboratoire de Physique des Hautes énergies, Modélisation et Simulation (LPHEM-S) à la Faculté des Sciences de Rabat, sous la direction du Professeur El Hassan SAIDI, chef de structure, et les deux Professeures Madame **Lalla Btissam DRISSI** PES et Madame **Khadija HTOUTOU** PH, mes encadrantes de thèse.

Je tiens à exprimer ma très vive reconnaissance et toute ma gratitude envers mon encadrante, Madame **Lalla Btissam DRISSI**, Professeure PES à la faculté des Sciences de Rabat, Université Mohammed V, pour sa sympathie, sa disponibilité, son soutien permanent, ses idées, ses conseils, ainsi que pour sa participation au bon déroulement de ce travail.

Je tiens à exprimer ma profonde et sincère gratitude à mon Co-encadrante, Madame **Khadija HTOUTOU**, Professeure PH au Centre Régional des Métiers de l'Education et de la Formation (CRMEF) de Fès-Meknès, pour m'avoir donné l'opportunité de travailler sous sa direction et pour m'avoir fourni des conseils précieux tout au long du voyage qui a abouti à cette thèse. Son dynamisme, sa vision, sa sincérité et sa motivation m'ont profondément inspiré. Elle m'a appris la méthodologie pour mener à bien la recherche et présenter les travaux le plus clairement possible. Je lui suis très reconnaissant pour ce qu'elle m'a offert, elle m'avait continuellement soutenu dans tous les domaines, qu'ils soient scientifiques ou non. Ce fut un grand privilège et un honneur de travailler et d'étudier sous sa direction. Je n'aurais pas pu imaginer avoir une meilleure directrice de thèse.

Je voudrais exprimer ma gratitude à Monsieur **Larbi SETTI**, Professeur PES à la faculté polydisciplinaire de Larache, une personne de principe et de rigueur, de nous avoir honoré en acceptant de présider ce jury.

Je voudrais sincèrement remercier Monsieur **Mohammed TAIBI**, Professeur PH à la faculté des sciences de Ain Chock, de nous avoir honoré en acceptant d'être l'un des rapporteurs externe de cette thèse. Ses commentaires opportuns et perspicaces ont été extrêmement utiles pour peaufiner les versions préliminaires de la thèse. Il mérite une mention spéciale pour son accueil, ses conseils, ses directives et son savoir-faire.

Je remercie chaleureusement Madame **Omkaltoume EL FATNI**, Professeure PH à la faculté des sciences de Rabat, qui a gentiment accepté de faire partie du jury et de servir de rapporteur.

Je remercie Monsieur **Rachid AHL LAAMARA**, Professeur PH à la faculté des Sciences de Rabat de l'Université Mohammed V-Rabat, pour l'intérêt qu'il a manifesté en participant en tant que rapporteur. Je le remercie pour son aide et ses précieux conseils durant ces années, pour sa rigueur et son souci de clarté qui m'ont aidé à aller plus loin. Ses encouragements constants m'ont donné suffisamment de confiance pour tenir jusqu'au bout. Soyez assuré, Monsieur, de toute mon estime et de mon profond respect.

Je remercie profondément Monsieur **Mohcine Drissi EL BOUZAI**DI, Professeur PA à Ecole Nationale d'Architecture de Tétouan, d'avoir accepté notre invitation à participer à ce jury. Je le remercie pour m'avoir accompagné tout au long de mon travail. Je le remercie également pour son amitié et son empathie.

Je n'oublierai jamais un grand homme, Monsieur le Professeur **El hassan SAIDI**, Responsable de LPHEM-S : Laboratoire de physique des Hautes énergies, Modélisation et Simulation à la Faculté des Sciences de Rabat. J'ai eu le grand plaisir et l'honneur d'être un de ses étudiants.

Pour conclure, je tiens à remercier les membres de ma famille et mes amis pour leur soutien et leur support moral.

Résumé

Les nanofils et les nanotubes magnétiques ont été largement étudiés pour leurs applications variées, allant du stockage de l'information aux biomédicales. Cette multitude de fonctionnalités de telles nanostructures magnétiques sont dues à leurs tailles nanométriques, qui génèrent des phénomènes atypiques. Dans cette logique, plusieurs travaux théoriques et expérimentaux ont été consacrés à l'exploration des propriétés magnétiques de ce type de nanomatériaux.

Le but de cette thèse est d'étudier les propriétés magnétiques et thermodynamiques des nanofils et nanotubes à spins mixtes et à structure hexagonale, en utilisant la simulation numérique de Monte-Carlo basée sur l'algorithme de Métropolis. Pour atteindre nos objectifs, nous avons mis un plan pratique composé de deux volets : l'un théorique et conceptuel et le deuxième a un aspect pratique. Dans le premier volet, nous avons présenté en bref des généralités sur le magnétisme, la morphologie des nanomatériaux et leurs propriétés magnétiques et hystériques, les différents modèles de spins ainsi que les méthodes théoriques et numériques utilisées dans notre champ de recherche. Le deuxième volet est consacré à nos différentes contributions réalisées. Il s'agit d'étudier en premier lieu les propriétés magnétiques des nanofils à spins mixtes et à deux couches alternées, en deuxième lieu, d'examiner les propriétés thermiques et magnétiques des nanotubes à spins mixtes de type cœur-coquille (core-shell). Pour ce faire, nous avons examiné en détail les effets de l'anisotropie cristalline, des interactions d'échange intra et intercouches, du champ magnétique externe longitudinal et de la température sur l'aimantation totale, les aimantations partielles, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique, l'énergie interne, les cycles d'hystérésis, les transitions de phases, ainsi que sur le phénomène de compensation. Nos résultats obtenus sont en bon accord avec d'autres travaux publiés d'ordres théorique et expérimental. Enfin, nous avons terminé notre thèse par une conclusion générale et une mise enperspective des travaux à effectuer à long terme.

Mots-clefs: Propriétés magnétiques, Nanostructures, Nanofils, Nanotubes, Modèle d'Ising à spins mixtes, Structure hexagonale, Couches alternés, Cœur-coquille, Simulation MonteCarlo, Température de compensation, Cycles d'hystérésis, Diagramme de phase

Abstract

Magnetic nanowires and nanotubes have been widely studied for their various applications, ranging from information storage to biomedical. This multitude of functionalities of such magnetic nanostructures are due to their nanometric sizes, which generate atypical phenomena. In this logic, several theoretical and experimental works have been devoted to the exploration of the magnetic properties of this type of nanomaterials. The aim of this thesis is to study the magnetic and thermodynamic properties of mixed-spin nanowires and nanotubes with hexagonal structure, using Monte-Carlo numerical simulation based on the Metropolis algorithm. In order to achieve our objectives, we put a practical plan composed of two parts : one theoretical and conceptual and the second has a practical aspect. In the first part, we presented in brief generalities on magnetism, the morphology of nanomaterials and their magnetic and hysteretic properties, the different spin models as well as the theoretical and numerical methods used in our research field. The second part is devoted to our various contributions. First, the magnetic properties of mixed-spin and alternating bilayer nanowires are studied. Second, the thermal and magnetic properties of mixed-spin core-shell nanotubes are examined. To this end, we have examined in detail the effects of crystalline anisotropy, intra- and inter-layer exchange interactions, external longitudinal magnetic field and temperature on the total magnetization, partial magnetization, susceptibility, specific heat, internal energy, hysteresis cycles, phase transitions, as well as on the compensation phenomenon. Our results are in good agreement with other published theoretical and experimental works. Finally, we ended our thesis with a general conclusion and a perspective of the work to be done in the long term.

Keywords : Magnetic and thermodynamic properties, Nanostructures, Nanowires, Nanotubes, Mixed spin Ising model, Hexagonal structure, Alternating layers, Core-shell, Monte Carlo simulation, Temperature compensation, Hysteresis cycles, Phase diagram.

Table des matières

Dédicace	i
Remerciement	ii
Résumé	iv
Abstract	v
Introduction Générale	1
I Généralités sur le magnétisme, les nanomatériaux, les propriétés magnétiques et hystérétiques	9
1 Magnétisme	11
1.1 Magnétisme à l'échelle macroscopique	11
1.2 Magnétisme à l'échelle atomique	12
1.2.1 Moment magnétique du noyau	12
1.2.2 Moment magnétique électronique	12
1.2.3 Moment cinétique orbitale auteur du noyau :	13
1.3 Classification des matériaux magnétiques	14
1.3.1 Magnétisme non ordonné ou non coopératif : magnétisme ordinaire	15
1.3.2 Magnétisme ordonné ou coopératif : magnétisme extraordinaire	18
2 Morphologie des nanomatériaux	24
2.1 Taille et forme des nanomatériaux	24
2.1.1 Dimensionnel zéro	24
2.1.2 Unidimensionnel	25
2.1.3 Bidimensionnel	25

	2.1.4	Tridimensionnel	25
	2.1.5	Effets de Surface	26
2.2	Nanofils	26	
	2.2.1	Introduction	26
	2.2.2	Nanofils à structure alternés ou multi-segmentés	29
	2.2.3	Nanofils multi-élémentés ou nano-composites	29
	2.2.4	Nanofils à structure cœur-coquille	29
2.3	Nanotubes	31	
	2.3.1	Introduction	31
	2.3.2	Nanotube de carbone à simple feuillet	32
	2.3.3	Nanotube de carbone à multi feuillets	32
3	Propriétés magnétiques des nanomatériaux	33	
3.1	Domaines magnétiques des nanomatériaux	34	
3.2	Interactions d'échanges magnétiques	36	
	3.2.1	Interactions d'échanges magnétiques dans les isolants	40
	3.2.2	Interactions d'échanges magnétiques dans les métaux	42
3.3	Anisotropies magnétiques des nanomatériaux	47	
	3.3.1	Définition	47
	3.3.2	Anisotropie magnéto-cristalline	48
	3.3.3	Anisotropie des contraintes ou magnéto-élastique	48
	3.3.4	Anisotropie de forme	49
	3.3.5	Anisotropie de surface ou d'interface	50
4	Transitions de phase et Classification de Néel	50	
4.1	Classification des transitions de phase	55	
	4.1.1	Classification d'Ehrenfest	55
	4.1.2	Classification de Landau	56
4.2	Températures de transition	57	
	4.2.1	Température de Curie	58
	4.2.2	Température de Néel	59
	4.2.3	Comparaison entre la température de Curie et de Néel	60
	4.2.4	Température de compensation	60
4.3	Classification de Néel	61	
5	Propriétés hystérétiques	63	
5.1	Définition	63	
5.2	Courbe de première aimantation	63	

5.3	Cycles d'hystérésis magnétiques pour les matériaux doux et durs	65
5.3.1	Matériaux magnétiques doux	65
5.3.2	Matériaux magnétiques durs	65
II	Modèles de spin et méthodes de calcul	67
1	Introduction	67
2	Modèles de spin quantiques et classiques	70
2.1	Modèle d'Ising	70
2.2	Modèle de Potts	71
2.3	Modèle de Blume-Emery-Griffiths	74
2.4	Modèles de spin continu	74
3	Simulations de Monte-Carlo	75
3.1	Introduction	75
3.2	Principes de la simulation de Monte-Carlo	76
3.2.1	Estimateur	76
3.2.2	Échantillon important	77
3.2.3	Ergodicité	78
3.2.4	Balance détaillée	79
3.2.5	Taux d'acceptation	80
4	Algorithmes de calcul	81
4.1	Algorithme de Metropolis	81
4.1.1	Implémentation de l'algorithme de Metropolis	84
4.1.2	Mesures et erreurs	86
4.2	Algorithme de Wolff	89
4.3	Algorithme de Swendsen-Wang	92
4.4	Algorithme de Niedermayer	94
III	Étude des propriétés magnétiques dans les nanofils hexagonaux à spins mixtes et à deux couches alternées	99
1	Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1, 1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers (In Materials Research Express 4(11) (2017) 116108.)	102
1.1	Présentation du système étudié	102
1.2	Résultats et discussion	104
1.2.1	Diagrammes de phase	104

1.2.2	Propriétés magnétiques et thermodynamiques	105
1.2.3	Cycles d'hystérésis	106
1.3	Conclusion	108
2	Thermodynamic and magnetic properties of a mixed spins (3/2, 5/2) Ising nanowire with hexagonal structure: Monte Carlo simulation (Indian Journal of Physics 2022)	109
2.1	Présentation du système étudié	109
2.2	Résultats et discussion	109
2.2.1	Propriétés magnétiques et thermodynamiques	110
2.2.2	Cycles d'hystérésis	113
2.2.3	Diagrammes de phase	114
2.3	Conclusion	117
3	The magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-(3/2; 2) hexagonal Ising nanowire system with alternate layers (Solid State Communications 336 (2021) 114418.)	117
3.1	Présentation du système étudié	117
3.2	Résultats et discussion	117
3.2.1	Propriétés magnétiques et thermodynamiques	118
3.2.2	Diagrammes de phase	121
3.2.3	Cycles d'hystérésis	123
3.3	Conclusion	125

IV Étude des propriétés magnétiques dans les nanomatériaux de type nanofils et nanotubes à spins-(3/2; 5/2) et à structure coeur-coquille (core-shell) 127

1	Magnetic compensation and hysteresis loops in a cylindrical ferrimagnetic nanotube of a mixed spin-(3/2, 5/2) with core-shell structure (In Chinese Journal of Physics 2022)	130
1.1	Présentation du système étudié	130
1.2	Résultats et discussion	131
1.2.1	Propriétés magnétiques et thermodynamiques	131
1.2.2	Diagrammes de phase	134
1.2.3	Cycles d'hystérésis	135
1.3	Conclusion	140

2	Hysteresis loops and compensation behavior of ferrimagnetic mixed spin (3/2; 5/2) hexagonal Ising nanowire with core-shell structure: Monte Carlo Simulation (In Journal of Cluster Science 2022)	141
2.1	Présentation du système étudié	141
2.2	Résumé de la publication	142
	Conclusion générale	143
	Bibliographie	147

Table des figures

I.1	Moment cinétique associé au (a) mouvement orbital autour du noyau, (b) de spin [1].	13
I.2	Atome de Bohr : L'électron se déplace sur une orbite circulaire [1].	14
I.3	Magnétisme : (a) En l'absence du champ magnétique externe, (b) En présence du champ magnétique externe.	15
I.4	Paramagnétisme : (a) En l'absence du champ magnétique externe, (b) En présence du champ magnétique externe h.	18
I.5	Différentes classes de magnétisme ordonné.	19
I.6	Transition ferromagnétisme-paramagnétisme.	20
I.7	Différentes formes des nanomatériaux.	24
I.8	Illustration schématique de la synthèse de nanofils multi-composants assistée par un modèle.	28
I.9	Principales types de nanofils hybrides à base de polymères conjugués : a) nanofils à couches alternés, b) nanofils cœur-coquille et c) nanofils multi-éléments.	30
I.10	Nanotubes de carbone à simple feuillet.	32
I.11	Nanotubes de carbone à multi feuillets.	33
I.12	Évaluation des différents effets de taille sur le comportement magnétique d'un métal de transition à l'état massif et à l'échelle nanométrique.	35
I.13	Illustration schématique des relations coercivité-taille des petites particules.	36
I.14	Interaction superéchange : L'arrangement antiferromagnétique (b), est moins énergétique que l'arrangement ferromagnétique (a) [1].	40
I.15	Interaction Dzyaloshinski-Moriya [1].	42

I.16	Délocalisation des électrons dans les bandes d qui sont à moitié pleines, presque vides ou presque pleines [1].	44
I.17	Fonction $F(\xi)$ de RKKY. Notez que $F(\xi)$ devient très grande lorsque $\xi < 4$ [1].	46
I.18	Diagramme de phase pression-température (P, T) . Toutes les transitions de phase sont discontinues, sauf au point critique (C).	53
I.19	Diagramme de phase d'une substance ferromagnétique dans le plan (H, T) . Il existe une ligne de discontinuité, sur l'axe $H = 0$, pour une température inférieure à la température critique T_c	53
I.20	Courbes d'aimantation $(M(H))$ pour une substance ferromagnétique en fonction de la températures. L'aimantation présente une discontinuité quand le champ magnétique H change de signe pour $T < T_c$. Cette discontinuité n'existe plus dans le cas $T > T_c$	54
I.21	Exemple de diagramme de phase montrant une température tri-critique.	54
I.22	Variations d'aimantations en fonction de la température, le cas d'une transition de phase du premier ordre et du second ordre, selon la théorie de Landau	57
I.23	Variation thermique d'aimantation totale.	58
I.24	Variation thermique d'aimantation totale.	61
I.25	Représentation schématique des différents types d'aimantation ferrimagnétique en fonction de la température [116].	62
I.26	(Cycle d'hystérésis) d'un matériau ferromagnétique $(ABCDEFA)$. La courbe $M(H)$ pour un matériau initialement démagnétisé (ou première courbe d'aimantation) en trait continu (OA) . Différentes quantités: l'aimantation de saturation M_s , le champ coercitif H_c et l'aimantation rémanente M_r	63
I.27	Cycle du matériau doux présenté à droite et cycle du matériau dur illustré à gauche [95].	65
II.1	Courbe du rapport d'acceptation donné par l'équation (II.29) (ligne continue). Ce taux d'acceptation donne lieu à un algorithme qui échantillonne correctement la distribution de Boltzmann, mais qui est très inefficace, puisqu'il rejette la grande majorité des coups qu'il sélectionne pour considération. Le taux d'acceptation de Metropolis (ligne pointillée) est beaucoup plus efficace [156].	83
II.2	Diagramme de flux d'une simulation de Monte-Carlo avec l'algorithme de Metropolis [158]	85

II.3	Retournement d'amas dans une simulation du modèle d'Ising 2D. Les cercles pleins et ouverts représentent les spins ascendants et descendants dans le modèle [156].	90
III.1	Nanofil hexagonal à deux couches alternées: couches à spins- $S = 1$ et couches à spins- $\sigma = 1/2$, (a) coupe transversale et (b) tridimensionnelle, [179].	102
III.2	Diagramme de phase du système dans le plan $(T; D/J_s)$ pour les interactions d'échanges $R_1 = 0.1$, et $(R = -0.2; -0.4; -0.8; -1.0)$ [193].	104
III.3	Aimantation longitudinale totale (a), Aimantations partielles des couches à spins S et σ (b), Susceptibilité magnétique totale χ (c), Chaleur spécifique C_v (d) et énergie interne totale E (e) en fonction de la température en l'absence des champs cristallin et magnétique externe pour des valeurs négatives sélectionnées de l'interaction d'échange R et pour la valeur fixée de $R_1 = 1.8$. [193]	106
III.4	Aimantation longitudinale totale (a), aimantations partielles des couches S et σ (b), susceptibilité magnétique totale χ (c), chaleur spécifique C_v (d) et énergie interne totale E (e) en fonction de la température pour différentes valeurs négatives de D/J_s , et pour $R_1 = 0.1$, $R = -0.2$ [193].	107
III.5	Cycles d'hystérésis pour les différentes valeurs du champ cristallin longitudinal D/J_s dans le cas où $k_B T/J_s = 0.2$, $R = -0.1$ et $R_1 = 0.5$ [193].	107
III.6	Cycles d'hystérésis pour les différentes valeurs de l'interaction d'échange anti-ferromagnétique R dans le cas où $k_B T/J_s = 0.2$, $D/J_s = -3.0$ et $R_1 = 0.5$ [193].	107
III.7	Cycles d'hystérésis pour les différentes valeurs de la température $k_B T/J_s$ dans le cas où $D/J_s = -5$, $R = -0.1$ et $R_1 = 0.5$ [193].	108
III.8	Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_σ et M_s (b), susceptibilité totale χ (c), chaleur spécifique C_v (d) et énergie interne (e) en fonction de la température en absence des champs cristallin et magnétique externe pour des valeurs négatives de $(R = -0.05; -0.1; -0.2)$, où $R_1 = 0.2$ [194].	110
III.9	Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_σ et M_s (b), susceptibilité totale (c), chaleur spécifique (d) et énergie interne (e) en fonction de la température en absence des champs cristallin et magnétique externe pour les différentes valeurs de $(R_1 = 0.07; 0.1; 0.2)$, où $R = -0.1$ [194].	111

III.10 Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_σ et M_s (b), susceptibilité magnétique totale (c), chaleur spécifique (d) et énergie interne (e) en fonction de la température pour différentes valeurs de $(D/J_s = -0.1; 0.1; 0.3; 1.0; 3.0; 5.0)$, où $R = -0.1$, $R_1 = 0.05$ [194].	112
III.11 Cycles d'hystérésis pour des valeurs fixes de $R = -1, 0$, $R_1 = 0, 1$, $T/J_s = 0, 1$ et pour les différentes valeurs négatives de $D/J_s = -3.0$ (a); $D/J_s = -5.0$ (b); et $D/J_s = -7.0$ (c) [194].	113
III.12 Cycles d'hystérésis pour des valeurs fixes de $R = -1.0$, $R_1 = 0.1$, $D/J_s = -3.0$ et pour les différentes valeurs $T/J_s = 0.1$ (a); $T/J_s = 0.3$ (b); $T/J_s = 5.0$ (c); et $T/J_s = 7.0$ (d) [194].	114
III.13 Cycles d'hystérésis pour des valeurs fixées de $R_1 = 0.1$, $D/J_s = -3.0$, et $T/J_s = 0.1$ et pour les différentes valeurs $R = -1.0$ (a); $R = -0.5$ (b); $R = 0.5$ (c); et $R = 1.5$ (d) [194].	115
III.14 Variation de température critique et de température de compensation en fonction de l'interaction d'échange R_1 en l'absence des champs cristallin et magnétique externe à une valeur fixée de $R = -0, 1$ [194].	115
III.15 Variation de température critique et de température de compensation en fonction du champ cristallin D/J_s pour $R = -0, 1$ et $R_1 = 0, 05$ [194].	116
III.16 Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_s et M_σ (b), susceptibilité magnétique totale χ (c), chaleur spécifique (d) et énergie interne (e) en fonction de la température en absence du champ magnétique externe pour des valeurs positives de $(D/J_s = 0.2; 1.0; 2.4; 4.5)$ à des valeurs fixées $R = -0.3$, et $R_1 = 0.1$ [109].	118
III.17 Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_s et M_σ (b), susceptibilité magnétique totale χ (c), chaleur spécifique (d) et énergie interne (e) en fonction de la température pour différentes valeurs de $(D/J_s = -0.5; -0.3; 0.0; 0.5)$ à des valeurs fixées $h = 0.5$, $R = -0.3$ et $R_1 = 0.1$ [109].	119
III.18 Aimantations partielles M_s et M_σ (a), aimantation totale M_T , susceptibilité magnétique totale χ (b), chaleur spécifique (c) et énergie interne (d) en fonction de la température en absence des champs cristallin et magnétique externe où $R = -0.3$ et $R_1 = 0.1$ [109].	120

III.19	Variation de l'aimantation totale M_T (a), les aimantations partielles M_s et M_σ (b), la susceptibilité totale magnétique χ (c), la chaleur spécifique (d) et l'énergie interne (e) en fonction de la température en absence du champ magnétique externe pour les différentes valeurs sélectionnées de ($R = -0.3; -0.7; -1.0; -2.0$), à $R_1 = 0.1$, $D/J_s = -0.5$ et $h = 0.5$ [109].	122
III.20	Diagramme de phase dans le plan $(T; D/J_s)$ à des valeurs fixées $R = -0.3$, $h = 0.5$ et $R_1 = 0.1$ [109].	122
III.21	Diagramme de phase dans le plan $(T; R)$ à des valeurs fixées $D/J_s = -0.5$, $h = 0.5$ et $R_1 = 0.1$ [109].	123
III.22	Cycles d'hystérésis à des valeurs fixées $D/J_s = -1.0$, $R = -1.0$, $R_1 = 0, 1$ et où $T/J_s = 0.3$ (a); $T/J_s = 2.0$ (b); $T/J_s = 3.0$ (c); $T/J_s = 5.0$ (d); $T/J_s = 6.0$ (e); $T/J_s = 7.0$ (f) [109].	124
III.23	Cycles d'hystérésis à des valeurs fixées $R = -0.3$ et $R_1 = 0.1$ à basse température $T/J_s = 0.5$ et pour $D/J_s = -2.0$ (a); $D/J_s = -2.5$ (b); $D/J_s = -3.0$ (c); $D/J_s = -4.0$ (d); $D/J_s = -6.0$ (e) [109].	124
IV.1	Représentation schématique d'un nanotube d'Ising hexagonal à une structure cœur-coquille : (a) coupe transversale et (b) tridimensionnelle. Les sphères orange indiquent les atomes du cœur (spin- $\sigma = 5/2$), et les sphères brunes les atomes de la coquille (spin- $S = 3/2$).	130
IV.2	Variation thermique de l'aimantation totale M_T (a), les aimantations partielles M_s et M_c (b), la susceptibilité totale magnétique χ (c), et la chaleur spécifique (d) en absence du champ magnétique externe pour les différentes valeurs sélectionnées de ($D_s = -1.5, -1.0, 0.0, 1.2, 2.0, 4.0, 9.0, 12.0$), lorsque $M_T = -0.5$, $h = 0.0$, $R = -0.5$ et $R_1 = 0.7$	132
IV.3	Variation thermique de l'aimantation totale M_T (a), les aimantations partielles M_s et M_c (b), la susceptibilité totale magnétique χ (c), et la chaleur spécifique (d) en absence du champ magnétique externe pour les différentes valeurs sélectionnées de ($R = -0.5, -1.0, -2.0, -3.0$), lorsque $R_1 = 0.7$, $R = -0.5$, $D_{sh} = -0.5$, et $h = 0.0$	133
IV.4	Variation thermique de l'aimantation totale M_T (a), les aimantations partielles M_s et M_c (b), la susceptibilité totale magnétique χ (c), et la chaleur spécifique (d) en absence du champ magnétique externe pour les différentes valeurs sélectionnées de $R_1 = 0.1, 0.7, 1.0, 1.6, 2.0, 3.0, 4.0, 6.0, 8.0$), lorsque $R = -0.5$, $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, et $h = 0.0$	134

IV.5 Diagramme de phase dans le plan $(T; D_{sh})$ pour les valeurs fixes de $h = 0.0$, $D_c = -0.5$ et $R_1 = 0.7$	135
IV.6 Diagramme de phase dans le plan $(T; D_{sh})$ pour les valeurs fixes de $h = 0.0$, $D_c = -0.5$ et $R_1 = 0.7$	136
IV.7 Diagramme de phase dans le plan $(T; D_{sh})$ pour les valeurs fixes de $h = 0.0$, $D_c = -0.5$ et $R_1 = 0.7$	136
IV.8 Cycles d'hystérésis à pour des valeurs fixes $D_c = -0.5$, $R = -1.0$, $R_1 = 1.0$, $T = 1.0$ et lorsque $D_{sh} = 2.0, -2, 0, -3, 0, -4, 0$).	137
IV.9 Cycles d'hystérésis à pour différentes valeurs de $T = 1.0, 4.0, 6.0, 10.0, 13.0$ avec des valeurs fixes $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -1.0$, $R = -1.0$ et $R_1 = 1.0$	138
IV.10 Cycles d'hystérésis à pour des valeurs sélectionnées de $R_1 = 3.0, 1.0, -1.0, -2.0$ et avec les valeurs fixes de $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -1.0$, $R = -1.0$ et $T = 1.0$	139
IV.11 Représentation schématique d'un nanofil d'Ising hexagonal à une structure cœur- coquille : (a) coupe transversale et (b) tridimensionnelle. Les sphères vertes indiquent les atomes du cœur ($\text{spin-}\sigma = 5/2$), et les sphères rouges les atomes de la coquille ($\text{spin-}S = 3/2$).	141

Liste des tableaux

I.1	Susceptibilités et perméabilités de divers éléments diamagnétiques [2].	16
I.2	Susceptibilités et perméabilités de divers éléments paramagnétiques [2].	18
I.3	Valeurs du rayon critique de Kittel et Brown pour différents matériaux [77]. . . .	36

Introduction Générale

Depuis des années, les systèmes magnétiques ont été largement étudiés expérimentalement du fait de leur grand intérêt dans la technologie moderne, et plus particulièrement dans l'enregistrement magnétique. La technologie de pointe basée sur les performances et les capacités des composantes exige la production de nouveaux matériaux homogènes et/ou hétérogènes (à spins mixtes) tels que les matériaux magnétiques fabriqués sous forme de couches minces ou multicouches, les super-réseaux, les plots et les nanostructures. Nous notons que grâce à l'orientation unie axiale d'une grandeur magnétique, il devient possible d'acquérir une anisotropie magnétique perpendiculaire sur le plan des couches d'un matériau. Cette anisotropie permet de diminuer la taille des domaines et de disposer d'une grande capacité de stockage d'information sur une bande magnétique [1].

Récemment, les matériaux nanostructures ont suscité un grand intérêt de la part des chercheurs ces dernières décennies en raison de leurs propriétés physicochimiques et plasmoniques et de leurs applications potentielles. Les considérables propriétés physicochimiques et biologiques des matériaux à l'échelle nanométrique permettent de nouvelles applications allant de la conservation de l'énergie et du renforcement de la résistance structurelle aux caractéristiques antimicrobiennes et aux surfaces autonettoyantes. La découverte de matériaux innovants et structures à l'échelle nanométrique, ainsi que le développement de nouvelles méthodes théoriques et expérimentales pour la recherche, peuvent offrir de nouvelles opportunités pour le développement et l'amélioration de nanomatériaux jusqu'alors inconnus [2].

Il a été prouvé que le nanomonde contient d'étonnantes formes selon l'effet de taille. Ce qui entraîne une augmentation du rapport surface/volume. De ce fait, les nanomatériaux ont une structure atomique et électronique qui dépend de leur taille et présentent en même temps

une évolution intermédiaire entre les deux états extrêmes de la matière, l'atome et le solide massif. Ils peuvent être des métaux, oxydes magnétiques, céramiques, milieu diélectrique, carbones, polymères ou encore des silicates qui présentent l'intérêt d'avoir des propriétés typiques par rapport aux mêmes matériaux à l'échelle macroscopique. Cela conduit à l'apparition de structures impressionnantes de propriétés physiques (magnétiques, optiques, etc). En outre, le domaine des nanotechnologies est l'un des rares secteurs capables de réunir des scientifiques issus de nombreux domaines (physiciens, biologistes, médecins, chimistes, etc.) [2, 3].

Parmi les nanomatériaux fortement étudiés, on trouve les nanostructures, telles que les nanofils, les nanotubes, les nanoparticules, les boîtes quantiques...) qui ont pris une place prépondérante dans les développements technologiques en raison de leurs propriétés physicochimiques ajustables, notamment leurs points de fusion, leurs conductivités électrique et thermique, leur sensibilité optique, leurs propriétés électroniques et biologiques, leur activité (photo)catalytique et leur mouillabilité. Ce qui leur confère des performances nettement supérieures à celles de leurs homologues en vrac.[2–5].

Les nanostructures ont été définies, ces dernières années, de manières différentes selon les organisations. Par conséquent, au niveau international, les chercheurs ne définissent pas les nanostructures avec une définition unique acceptée. Nous ne pouvons donc pas définir correctement les nanomatériaux sans définir d'abord les "dimensions nanométriques", c'est-à-dire 1-100 nm. En effet, les nanostructures et les nanomatériaux peuvent exhiber des caractéristiques exceptionnelles et divers de celles des composés chimiques équivalents de plus grandes dimensions. En règle générale, l'Organisation Internationale de Normalisation (ISO) définit un matériau nanostructure comme un "matériau ayant une dimension externe quelconque à l'échelle nanométrique ou ayant une structure de surface interne à l'échelle nanométrique" [6]. De même, la Commission Européenne (UE) décrit les nanostructures comme un "matériau manufacturé ou naturel" qui possède des particules non liées, agrégées ou agglomérées dont les dimensions externes sont comprises entre 1 et 100 nm". Généralement, l'existence de définitions variées selon les juridictions constitue un obstacle majeur aux efforts de réglementation, car elle entraîne une hésitation juridique dans l'utilisation de techniques de réglementation pour des nanostructures identiques. Les nanoparticules (NPs), les points quantiques, les nano-plates, les nanofibres, les nanofils et d'autres termes connexes ont également été définis sur la base de la définition ISO [6].

En d'autres termes, les nanofils sont des fils ultrafins ou des réseaux linéaires de points, formés par auto-assemblage. Ils peuvent être fabriqués à partir d'un large éventail de matériaux. Les nanofils semi-conducteurs en silicium, en nitrure de gallium et en phosphure d'indium ont démontré des caractéristiques optiques, électroniques et magnétiques remarquables comme le

cas des nanofils de silice qui peuvent courber la lumière dans des coins très étroits. Nous soulignons que les nanofils ont des applications potentielles dans le stockage de données à haute densité, soit comme têtes de lecture magnétiques, soit comme supports de stockage à motifs, et dans les nanodispositifs électroniques et optoélectroniques, pour les interconnexions métalliques des dispositifs quantiques et des nanodispositifs [5]. Ainsi, de plusieurs types de nanofils existent, incluant des matériaux métalliques (par exemple, Ni, Pt, Au), semi-conducteurs (comme Si, InP, GaN, etc.) [7], ou des matériaux diélectriques (*e.g.*, SiO_2, TiO_2) [7]. Les nanofils moléculaires organiques (par exemple l'ADN) ou inorganiques ($Mo_6S_9-xI_x$) se répétant [8, 9].

Actuellement, et au niveau expérimental, d'énormes efforts sont dirigés vers le développement et la synthèse de ces nanofils et nanotubes afin de maîtriser le contrôle de leurs propriétés. Il est donc nécessaire de créer et d'optimiser les protocoles de synthèse afin d'obtenir des objets de taille nanométrique contrôlée, avec une multitude de propriétés magnétiques dues à leur taille. En plus de la maturité du domaine de la nanotechnologie qui génère des matériaux avec des mesures spécifiques, les études expérimentales révèlent également de nouveaux défis concernant la synthèse de ces matériaux avec les normes souhaitées. Cette donnée nécessite également l'accompagnement des progrès dans la modélisation de tels systèmes et la caractérisation des nanomatériaux. De ce fait, il est essentiel de concevoir et de simuler des modèles de spin afin de profiter pleinement de la richesse des propriétés contenues dans ces modèles. Ce qui nous permettra de réduire relativement les coûts de synthèses connus jusqu'alors. Au niveau pratique, ces études expérimentales apporteront une vision claire sur le fonctionnement et le contrôle des tailles et des propriétés des systèmes basés sur des modèles théoriques. Celles ouvriront aussi de nouveaux horizons et perspectives aux chercheurs et spécialistes en (physique, biologie, chimie, et médecine entre autres) de fabriquer et synthétiser de nouveaux nanomatériaux. (voir le chapitre 1 pour plus de détails) [7].

D'un point de vue théorique, l'étude des propriétés magnétiques des systèmes nanofils et nanotubes, a été un champ de recherche en matière condensée aux plusieurs méthodes approximatives et modèles théoriques. Parmi eux, nous avons la théorie du champ effectif (EFT) qui a constitué le point de départ pour plusieurs méthodes de calcul telles que la méthode de l'amas fini fut introduite par N. Boccaro [10] en 1983 et développée par la suite par Benyoussef et Boccaro [11] en 1984, la méthode de l'opérateur différentiel qui a été également proposée par Honmura et Kaneyoshi [12, 13] en 1979 et la méthode de la distribution de la loi de probabilité qui a été introduite par Kerouad, Saber et Tucker [14] en 1993-1994.

En effet, la théorie du champ effectif (EFT) est souvent appliquée à l'étude du modèle d'Ising [15, 16]. Elle a la simplicité de la théorie du champ moyen (MFA) et présente de meilleurs résultats qualitatifs et quantitatifs. Elle ne s'exploite qu'à des systèmes dans lesquels le désordre

décrit par des variables discrètes. Elle consiste à prendre un spin central du réseau et à calculer sa valeur moyenne en fixant tous les autres spins. La valeur moyenne sur toutes les spins, donne l'équation d'état du système qui va permettre de calculer la température de transition ou la température de Curie ainsi que d'autres propriétés magnétiques et thermodynamiques [17]. Et l'autre théorie (MFA) a été développée pour considérer les systèmes à corps en interaction, Elle consiste à utiliser un seul spin S_i pour calculer son énergie en remplaçant tous les autres spins par leur valeur moyenne $\langle S_i \rangle$. Cette approximation utilisé pour étudier le comportement de la transition de phase et les propriétés magnétiques. Au cours de l'évolution des méthodes de modélisation des matériaux à l'échelle atomique et le développement de nombreux algorithmes, nous trouvons des techniques appelées les calculs ab-initio basées sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) [18], qui est une méthode quantique qui permet d'inclure les effets de corrélation électronique dans les calculs numériques. Celles-ci sont largement utilisées pour examiner les propriétés électroniques et magnétiques des oxydes et des semi-conducteurs. En mécanique statistique, nous rencontrons une autre méthode appelée groupe de renormalisation [19]. Cette méthode permet de déterminer les transitions de phase et les phénomènes critiques en se basant sur une transformation de l'hamiltonien qui décrit le système en un autre en laissant la fonction de partition invariante. Enfin, nous notons la méthode de Monte-Carlo qui est la base de tous nos calculs numériques en utilisant l'algorithme de Metropolis [19, 20].

Soulignons que la méthode de Monte-Carlo est une méthode de simulation numérique, particulièrement utilisée pour calculer des intégrales en dimensions supérieures que 1 (en particulier, pour mesurer des surfaces, des volumes, etc.), ils permettent aussi d'introduire une approche statistique du risque dans une décision financière. Le véritable développement de la méthode de Monte-Carlo s'est effectué, sous l'impulsion de John Von Neumann et Stanislas Ulam notamment, lors de la Seconde Guerre mondiale et des recherches sur la fabrication de la bombe atomique. Ils ont utilisé cette méthode probabiliste pour résoudre des équations aux dérivées partielles [20, 21].

Du point de vue des applications, à présent, cette méthode est indispensable dans des différents domaines de la finance, la mise au point de nouveaux microcomposants électroniques, en sismologie, en télécommunications, en chimie, en ingénierie ou en physique, mais aussi en biologie, en sciences sociales, etc. D'autre côté, en chimie, en physique, en biologie ou même en médecine, de plusieurs problèmes exigent déterminer des propriétés dynamiques d'un nombre élevé d'objets (particules atomiques, atomes, molécules ou macromolécules), qui ne sont pas réalisables que par des techniques de Monte-Carlo.

En ce qui concerne les propriétés magnétiques et thermodynamiques avec mélange de spins, qui occupent les sites de deux sous-réseaux, dans lesquels les spins d'une autre grandeur oc-

cupent l'un des sous réseaux et les spins d'une autre grandeur occupent l'autre sous-réseaux. Ces derniers sont importants pour étudier certains types de ferrimagnétisme, à savoir les nanomatériaux tel que les nanofils [22, 23] et les nanotubes [24, 25].

En utilisant la simulation de Monte Carlo, on a montré que les systèmes mixtes sont très riches en phénomènes critiques et tricritiques. L. Dan et al [26], ont étudié un nanofil ferrimagnétiques à structure hexagonale cœur-coquille et à spins-(1, 3/2). Ils ont montré que ce système présente une température de compensation, des aimantations obtenus de type-N, -Q, -R, -P, -S, ainsi que les phénomènes à trois et quatre boucles d'hystérésis. Les propriétés magnétiques d'un nanofil ferrimagnétique d'Ising à spins-(1, 2) et à structure hexagonale ont été étudié par R. Masrour et al [27]. Ils ont trouvé que ce système ne présente que des transitions de phase du second ordre, ainsi qu'une température de transition. J. Wei et al [28] ont examiné les cycles d'hystérésis d'un nanofil ferrimagnétique d'Ising à structure cubique sous l'effet des champs cristallin longitudinale et transversale en utilisant la théorie du champ effectif (EFT). Les résultats obtenus montrent que les phénomènes à trois et multi boucle d'hystérésis se trouvent pour certaines valeurs des champs cristallin longitudinale et transversale. Des études récentes à l'aide de la même méthode que dans les références [26, 27], ont été faites sur des nanotubes ferrimagnétiques d'Ising à structure hexagonale [24, 25], triangulaire [29] et cubique [30, 31]. Ils ont montré que le nanotube à structure hexagonale peut présenter le comportement de compensation, le point tricritique et une seule boucle d'hystérésis a été obtenu pour certains paramètres physiques. Les diagrammes de phases de nanotube à structure triangulaire présentent une température de compensation, ainsi que des transitions de phase de second ordre. De plus les phénomènes à deux et trois boucles d'hystérésis appliqués dans les dispositifs de mémoire multi-états [7, 32] sont obtenus. Enfin, pour le nanotube à structure cubique, J.Y. Liang et al ont montré que ce système présente deux température de compensation qui pourraient être applicable à la technologie de l'enregistrement magnéto-optique [29, 33].

En gardant à l'esprit le problème soulevé ci-dessus et en tant que contribution à la formulation de ces problèmes, nous aimerions citer les points suivants comme objectifs de notre thèse : Nous proposons d'abord d'élaborer des modèles de spin traitant, en particulier des nanofils et des nanotubes magnétiques de différentes morphologies et à structure hexagonale. Ensuite, l'étude théorique est menée à l'aide de la méthode de Monte-Carlo. Enfin, qu'explorer les propriétés magnétiques et thermodynamiques de ce type de nanomatériaux et de les manipuler.

Outre l'introduction générale et la conclusion, notre recherche s'articule sur deux grandes parties principales. Chaque partie, à son tour, se compose de deux chapitres. La première partie a un aspect théorique et conceptuel. Nous introduisons dans le premier chapitre des généralités sur le magnétisme, classifications des matériaux magnétiques, propriétés magnétiques des nano-

matériaux, transitions de phase et classification de Néel. Au terme de ce point, nous abordons également le comportement des cycles d'hystérésis. Dans le deuxième chapitre, nous présentons les différents Modèles de spin quantiques et classiques et les principes de la méthode de Monte Carlo (MC). Ensuite, nous représentons certains algorithmes permettant de générer numériquement des configurations du modèles d'Ising, en particulier l'algorithme de Métropolies, après-avoir évoqué les différentes méthodes numériques en relation avec notre recherche. En ce qui concerne la deuxième partie, elle est consacrée aux contributions et à la discussion des résultats obtenus. Par conséquent, dans le troisième chapitre, nous examinons les propriétés magnétiques et thermodynamiques des nanofils ferrimagnétiques hexagonaux d'Ising à spins mixtes et à deux couches alternés. Nous y abordons les aimantations totales et partielles, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique et l'énergie interne dans le cas des systèmes d'Ising à spins-(1/2, 1), (3/2, 5/2) et (3/2, 2), en utilisant la méthode de Monte-Carlo (MC) basée sur l'algorithme Métropolies. Les transitions de phase et les cycles d'hystérésis ont été également examinés en détail.

Dans le quatrième chapitre, nous introduisons les nombreux résultats obtenus pour un nanofil et nanotube d'Ising Hexagonaux à spin-(3/2,5/2) ayant la structure cœur-coquille (core-shell), dans la première et la deuxième section, respectivement. Nous discutons plus particulièrement les effets de l'anisotropie cristalline et du couplage d'échange cœur-coquille sur les différentes propriétés magnétiques, diagrammes de phases et cycles d'hystérésis du système.

Liste des contributions et communications : Certains travaux de recherche qui ont conduit à cette thèse ont déjà été en soumission et des autres publiés dans les ouvrages suivants.

Contributions et Publications :

- Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1,1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers, **Materials Research Express** 4(11) (2017) 116108 ;
- The magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-(3/2,2) hexagonal ising nanowire system with alternate layers, **Solid State Communications** (2021) 114418 ;
- Thermodynamic and magnetic properties of a mixed spins (3/2,5/2) ising nanowire with hexagonal structure : Monte Carlo simulation, **indian Journal of Physics** (2021) 1-10 ;
- Magnetic compensation and hysteresis loops in a cylindrical ferrimagnetic nanotube of a mixed spin-(3/2, 5/2) with core-shell structure, **Chinese Journal of Physics** 79 (2022) 362-373 ;
- Hysteresis loops and compensation behavior of ferrimagnetic mixed spin (3/2,5/2) hexagonal ising nanowire with core-shell structure : Monte Carlo Simulation, submitted in

Journal of Cluster Science (2021) ;

Communications :

- "Poster Communication in 1ST international Materials Science and Engineering for Green Energy Conference", organisé le 12 Mai 2017 à l'université al akhawayn ;
- "Poster Communication in the second international Materials Science and Engineering for Green Energy Conference", organisé le 27 Avril 2018 à l'université Mohammed 5, Faculté des sciences Rabat ;
- "Communication orale intitulée Monte Carlo study of the magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-5/2 and spin-3/2 using Ferrimagnetic nanowire with alternate layers", présenté lors des Journées Nationales des Doctorants et des Jeunes chercheurs organisé par l'académie Hassan 2 des Sciences et Techniques en collaboration avec la faculté des sciences de l'université Mohammed 5 de Rabat, et en partenariat avec le réseau RNJCS, du 18 au 20 Juillet 2018 à la faculté des sciences de Rabat ;
- "Communication intitulée La collaboration entre chercheurs et praticiens enseignants : Recherche bibliographique", présenté lors du Journée Scientifique National " Recherche and Enseignants", sous le thème "La recherche scientifique : Un levier essentiel dans le développement des savoirs des enseignants des sciences", qui s'est déroulé le 15 Novembre 2018, au CRMEF de Meknès ;
- "Communication par affiche intitulée Thermodynamic properties and hysteresis loops of a mixed spins (3/2,5/2) using ferrimagnetic nanowire with alternate layers : A Monte Carlo simulation", présenté lors du 1 ère Congrès National en Physique Fondamentale et ses Application 2019", tenu à la faculté Polydisciplinaire de Béni Mellal, les 19-20 Avril 2019.
- "Communication intitulée Simulation interactives pour les sciences", présenté lors du deuxième Journée Scientifique National " Expérimentation Numérique", sous le thème "L'Expérimentation Assistée par Ordinateur (EXAO) et Simulation Numérique dans l'Enseignement des sciences Physiques", qui s'est déroulé le 08 Juillet 2019, au CRMEF de Meknès ;

Chapitre I

Généralités sur le magnétisme, les nanomatériaux, les propriétés magnétiques et hystérétiques

Introduction

Jusqu'en 1800 environ, la seule source pratique de magnétisme était cette pierre noire de magnétite. En 1820, **Hans Christian Ørsted** a découvert au hasard que des particules chargées électriquement en mouvement produisent des champs magnétiques [34]. L'électricité et le magnétisme sont donc étroitement liés, ce sont en fait deux manifestations différentes de même phénomène appelé électromagnétisme, il a été le premier physicien à trouver un rapprochement entre ces deux disciplines (électricité et magnétisme), avec ce rapprochement il a présenté le début de la "révolution électromagnétique". En 1878, **James Alfred Ewing** a présenté pour la première fois une expérience sur le magnétisme et a inventé le mot "hystérésis". Le magnétisme est l'un des phénomènes physiques qui a le plus frappé l'imagination de l'homme, au point que ce mot désigne aujourd'hui des réalités très diverses. Il s'agit d'une science de physique forte, ancienne et néanmoins toujours d'actualité dont le champ d'application ne cesse de s'étendre [1].

Pour les nanomatériaux, ils sont généralement définis comme des matériaux composés d'un ensemble de substances dont au moins une dimension est inférieure à environ 100 nm. Les types courants de nanomatériaux comprennent les nano-filaments, les nanotubes, les nanofils,

Chapitre I. Généralités sur le magnétisme, les nanomatériaux, les propriétés magnétiques et hystérétiques

les nanocâbles, les films de nanothine, les dendrimères, les points quantiques, les matériaux composites et d'autres matériaux que la nanopoudre.

En raison de leur taille nanométrique (1 - 100 nm), les nanomatériaux présentent des propriétés physiques telles que les propriétés magnétiques, électroniques, électriques, optiques et chimiques [3–5]. Par exemple, dans les années 1970, des scientifiques japonais ont découvert que des métaux tels que le cuivre et l'argent, dotés de conductivités électrique et thermique, perdaient leur nature originelle après avoir été réduits à l'échelle nanométrique et devenaient non conducteurs et non thermiques. Dès que la taille se rapproche de la fraction nanométrique, le rapport surface/volume augmente proportionnellement et le pourcentage d'atomes à la surface d'un matériau devient plus important [3, 4]. Ce phénomène de rapport surface/volume élevé est responsable des propriétés exceptionnelles des nanomatériaux. Les propriétés physiques telles que les points de fusion et l'adsorption optique varient également beaucoup avec le changement de taille à l'échelle nanométrique.

Les nanomatériaux présentent également une activité catalytique plus élevée pour les réactions chimiques en raison de la croissance du nombre de sites de coin et de bord par rapport aux atomes de terrasse. Les matériaux nanocristallins à grains très fins présentent des propriétés mécaniques radicalement différentes, telles que la superplasticité, la dureté exceptionnelle, la ténacité et la résistance par rapport aux microstructures classiques [3]. Les nanomatériaux d'ingénierie ont également démontré un potentiel impressionnant en tant que transporteurs de médicaments, de protéines, d'ARNsi, d'enzymes et de biomolécules à haute efficacité dans les cellules [8, 9]. Au cours du dernier siècle, l'utilisation de nanomatériaux dotés de ces propriétés exceptionnelles a fait d'énormes bonds en avant en chimie, en physique, en biologie et en ingénierie.

Dans ce chapitre, les propriétés physiques de base des nanomatériaux magnétiques seront largement abordées. On vise à étudier des généralités sur le magnétisme, la morphologie des nanomatériaux et leurs propriétés magnétiques, hystérétiques et thermodynamique. Ainsi que leurs transitions de phase et la classification de Néel des aimantations.

Dans la première section, nous traitons le magnétisme à l'échelle macroscopique et atomique, puis nous définirons les différents types de magnétisme. Dans la deuxième section, nous présenterons la morphologie et les différents types des nanomatériaux avant de passer à la synthèse des systèmes nanofils et nanotubes. Dans la troisième section, nous donnons les caractéristiques magnétiques des nanomatériaux telles que les domaines, les interactions et les anisotropies magnétiques. En outre, dans la quatrième section nous définirons les différents types de transitions de phase ainsi que la classification des différentes aimantations d'après la théorie de Néel. Les propriétés hystériques seront également présentées et discutées dans la dernière section.

1 Magnétisme

1.1 Magnétisme à l'échelle macroscopique

Les propriétés magnétiques d'un matériau peuvent revêtir diverses formes très. Au niveau macroscopique, les nombreux comportements magnétique d'un matériau sont définis à partir de leur type de réponse magnétique délivrée sous l'effet d'une application excitation magnétique $\vec{H}$ en (A/m) .

Les grandeurs magnétiques macroscopiques fondamentales de ce comportement sont les suivantes [1, 35] :

- Le vecteur aimantation $\vec{M}$: Correspond au moment magnétique par unité de volume :

$$\vec{M} = \frac{d\vec{m}}{dV} \quad (\text{I.1})$$

Où $d\vec{m}$ est le petit moment magnétique apparaissant dans une unité de volume dV sous l'application du champ perturbateur. (en $[M] = A/m$) ($1A/m = 10^{-3}Gauss$)

- L'induction magnétique $\vec{B}$: C'est l'origine des effets à distance du magnétisme ou la réponse du milieu à l'excitation magnétique, colinéaire et proportionnelle à l'aimantation induite par $\vec{B}_{ext}$, s'exprime en tesla (T).

$$\vec{B}_I = \mu_0 \vec{M} \quad (\text{I.2})$$

- Champ magnétique $\vec{H}$: Au contraire à l'induction magnétique, dans un matériau le champ magnétique a vérifié le théorème d'Ampère au sens des courants libres, c'est-à-dire qu'il ignore les courants d'aimantation dans le vide. S'exprime en ampères par mètre (A/m) .

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}_{ext}}{\mu_0} \quad (\text{I.3})$$

L'induction magnétique totale $\vec{B}$ est la superposition de deux inductions : $\vec{B} = \vec{B}_{ext} + \vec{B}_I$ c'est à dire :

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0(\vec{H} + \chi\vec{H}) = \mu\vec{H} \quad (\text{I.4})$$

$\vec{B}$ déterminé en *Tesla* ($1T = 10^4Gauss$). Où :

- $\mu_r = 1 + \chi$ est la perméabilité relative du matériau (sans dimension).
- $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ est la perméabilité du vide (qui s'exprime en H/m).

- $\mu = \mu_0 \mu_r = \frac{B}{H}$ est la perméabilité magnétique du matériau.
- $\chi = \frac{M}{H}$ est la susceptibilité magnétique.

Energie de moment magnétique est : $E = -mB$.

A titre d'exemple, on donne quelques ordres de grandeur d'inductions magnétiques mesurées :

- Champ magnétique terrestre : $5 \cdot 10^{-5} T$
- Electro-aimant à noyau de fer : 1 à $2 T$
- Bobine supra-conductrice : 6 à $8 T$

1.2 Magnétisme à l'échelle atomique

L'existence de moments magnétiques élémentaires atomiques (de l'ordre de $10^{-23} A.m^2$) est à la source des propriétés magnétiques macroscopiques des matériaux. En effet, si l'on considère un atome « libre », autrement dit qui n'est soumis ni à un champ magnétique extérieur ni à l'interaction d'échange avec ses proches voisins (cas du paramagnétisme), celui-ci présente un moment magnétique élémentaire qui est la somme des moments magnétiques du noyau d'une part et le moment magnétique électronique d'autre part. La théorie de la mécanique quantique permet de calculer cette grandeur magnétique élémentaire. Pour cela, nous considérerons en premier lieu l'atome de Bohr comme cas simple, constitué uniquement du noyau et d'un électron. Ce concept sera ensuite utilisé au cas plus général d'atomes contenant plusieurs électrons.

1.2.1 Moment magnétique du noyau

Dans un atome, les différents constituants du noyau sont en mouvement. C'est ce mouvement qui est à la source de l'existence d'un moment magnétique propre au noyau. La contribution magnétique du noyau au moment total de l'atome est très faible : de l'ordre de $5 \cdot 10^{-27} A.m^2$ contre approximativement $10^{-23} A.m^2$ pour l'atome. Celle-ci sera donc négligée par la suite [1, 36].

1.2.2 Moment magnétique électronique

Le moment magnétique électronique est le résultat de trois composantes comme le montre la figure 1.1 :

- Le moment magnétique orbital, dû à la gravitation de l'électron autour du noyau.
- Le moment magnétique de spin, dû au moment cinétique intrinsèque de l'électron.
- Le couplage des mouvements spinaux et orbitaux.

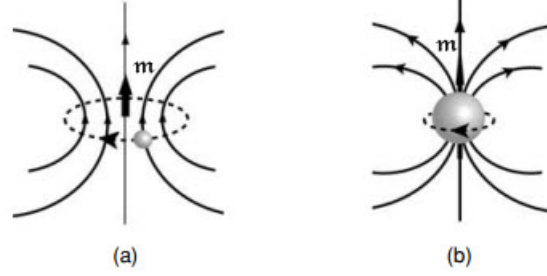


Figure I.1 – Moment cinétique associé au (a) mouvement orbital autour du noyau, (b) de spin [1].

1.2.3 Moment cinétique orbitale autour du noyau :

Le moment cinétique orbital est la somme des moments orbitaux de tous les électrons [1].

$$m = I \times S = \left(\frac{-e}{\omega}\right) \times (\pi r^2) = \left(\frac{-eV}{2\pi r}\right) \times (\pi r^2) = \frac{-erV}{2} = \frac{-e}{2m_e} \ell \quad (\text{I.5})$$

Où $I = \frac{-e}{\omega}$ est le courant équivalent, V est la vitesse de l'électron, $\omega = \frac{2\pi r}{V}$ est la vitesse angulaire d'électron, r est le rayon de chaque orbite, m_e est la masse d'électron, $\ell = (m_e r \times V)$ est le moment angulaire orbital.

Le moment angulaire orbital est quantifié en unités de $\hbar$, de telle manière que la composante de m suivant une direction particulière, on choisit par exemple la direction z , alors le moment cinétique orbitale devient :

$$m_z = \frac{-e}{2m_e} m_\ell \hbar = -\mu_B m_\ell \quad (\text{I.6})$$

Où $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ est le nombre quantique orbital magnétique, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ est le magnéton de Bohr où $1\mu_B = 9,274.10^{-24} A.m^2$.

Dans un atome à n -électrons :

$$\vec{\mu}_L = -\mu_B \vec{L} \quad (\text{I.7})$$

Moment cinétique de spin S : Le moment magnétique de spin, dû au mouvement autour de son propre axe décrit dans la figure I.2. L'électron possède un moment angulaire de spin intrinsèque dont le nombre quantique $s = \frac{1}{2}$, et un moment magnétique intrinsèque, sans rapport avec un mouvement orbital quelconque, qui ne peut adopter que l'une des deux orientations discrètes (soit vers le haut soit vers le bas) sous un champ magnétique. Tous les fermions ont

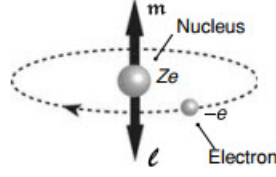


Figure I.2 – Atome de Bohr : L'électron se déplace sur une orbite circulaire [1].

un spin et un moment magnétique associé. Il s'avère que le moment magnétique associé au spin de l'électron n'est pas la moitié, mais presque exactement une magnétone de Bohr [1, 36].

$$m = \frac{-e}{m_e} s \quad (\text{I.8})$$

Où $s = m_e r \times V$ est le moment angulaire de spin. Le nombre quantique du spin magnétique est $m_s = \pm \frac{1}{2}$, il n'y a donc que deux états de moment angulaire possibles. La composante du spin le long d'un axe quelconque est de $\frac{1}{2}\hbar$.

$$m_z = \frac{-e}{m_e} m_s \hbar = -2\mu_B m_s \quad (\text{I.9})$$

Où $m_s = \pm \frac{1}{2}$

Dans un atome à n—électrons :

$$\vec{\mu}_S = -2\mu_B \vec{S} \quad (\text{I.10})$$

Couplage des mouvements spinaux et orbitaux J : En général, un électron atomique possède à la fois un spin et un moment angulaire orbital. Ils peuvent être couplés par interaction spin-orbite pour créer un moment angulaire électronique total j , avec le moment magnétique résultant μ est alors présenté par :

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\mu_B (\vec{L} + 2\vec{S}) \quad (\text{I.11})$$

1.3 Classification des matériaux magnétiques

Il existe différentes types de magnétismes, présentées selon les caractéristiques de la réponse magnétique du matériau sous l'application d'un champ magnétique externe [1, 37, 38]. La nature magnétique d'un matériau est donnée par sa susceptibilité magnétique totale χ . D'une manière générale, les matériaux sont classés grâce à leur comportement magnétique. Le pre-

mier groupe est constitué de matériaux magnétiques désordonnés ou magnétismes ordinaires sous l'effet d'un champ magnétique externe par exemple le diamagnétisme, le paramagnétisme et le superparamagnétisme. Un deuxième groupe est constitué de matériaux magnétiques ordonnés ou magnétisme extraordinaire ainsi que les ferromagnétiques, les antiferromagnétiques, les ferrimagnétiques et les antiferromagnétiques.

De plus, il y a d'autres types différents d'ordre magnétique dans les solides cristallins et amorphes dû au comportement de l'aimantation $\vec{M}$ ou de la susceptibilité magnétique χ , comme métamagnétisme, helimagnétisme, asperomagnétisme, sperimagnétisme, speromagnétisme.

1.3.1 Magnétisme non ordonné ou non coopératif : magnétisme ordinaire

Le magnétisme non ordonné ne développe pas d'interactions à longue distance et n'est donc pas présentée une aimantation spontanée macroscopique. Lorsque les atomes porteurs de moments se trouvent dilués dans le réseau cristallin, sont à distance les uns des autres, le matériau devient paramagnétique. Si les atomes d'un matériau est non porteurs de moment, c'est le cas d'un matériau diamagnétique.

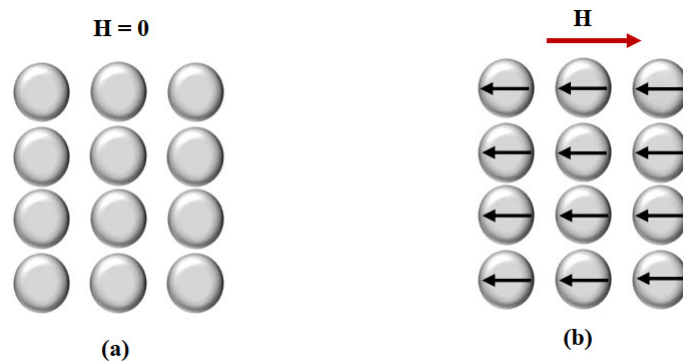


Figure I.3 – Magnétisme : (a) En l'absence du champ magnétique externe, (b) En présence du champ magnétique externe.

Diamagnétisme : Les substances diamagnétiques sont caractérisés par des valeurs de susceptibilité très faibles, négatives et indépendantes de la température de l'ordre de ($\chi \approx -10^{-6}$) et ne présentent pas des moments magnétiques atomiques permanents présentés sur la figure I.3. Les éléments non métalliques, le cuivre *Cu*, l'argent *Ag*, l'or *Au*, le bismuth *Bi* et le béryllium *Be* sont autant d'exemples d'éléments diamagnétiques comme le montre le tableau I.1. Lorsqu'on applique un champ magnétique externe h à un tel matériau, les atomes ont tendance à créer une aimantation induite dans le sens inverse du champ appliqué h , qui s'oppose ainsi

Chapitre I. Généralités sur le magnétisme, les nanomatériaux, les propriétés magnétiques et hystérétiques

	χ	μ_r
<i>Bi</i>	-1.31×10^{-6}	0.99993
<i>Be</i>	-1.85×10^{-6}	0.99998
<i>Ag</i>	-2.02×10^{-6}	0.99997
<i>Au</i>	-2.74×10^{-6}	0.99996
<i>Ge</i>	-0.56×10^{-6}	0.99999
<i>Cu</i>	-0.77×10^{-6}	0.99999

Tableau I.1 – Susceptibilités et perméabilités de divers éléments diamagnétiques [2].

à celui-ci (analogie avec la loi de Lenz en électromagnétisme). Le diamagnétisme ne dépend pas de la température et existe toujours dans les espèces chimiques, même si elles possèdent un moment magnétique, puisqu'il est dû à la présence d'électrons appariés. Cependant, il passe inaperçu dans les matériaux présentant des propriétés ferromagnétiques ou paramagnétiques et donc constitue un phénomène négligeable par rapport aux autres.

La configuration électronique en coquille fermée conduit à un moment magnétique net égal à zéro (les moments de spin et les moments d'orbitale de tous les e^- à l'intérieur d'un atome sont orientés de telle sorte qu'ils s'annulent mutuellement). Les gaz nobles monoatomiques (par exemple *He*, *Ne*, *Ar*, *Kr*, etc.) sont diamagnétiques. Dans les gaz polyatomiques (par exemple H_2 , N_2 ... mais pas O_2), la formation de la molécule entraîne une configuration électronique en coquille fermée, ce qui rend les gaz diamagnétiques. De nombreux matériaux à liaison ionique (par exemple *NaCl*, *MgO*, etc.) et à liaison covalente (*C* – *diamond*, *Ge*, *Si*) conduisent également à une configuration en coquille fermée, ce qui fait du diamagnétisme l'effet magnétique prédominant. La plupart des composés organiques (y compris des types de liaisons) sont diamagnétiques.

Paramagnétisme : Les matériaux paramagnétiques sont caractérisés par des valeurs de susceptibilités positives $\chi \approx 10^{-4}$ à 10^{-2} et se composent de moments magnétiques atomiques permanents par contre les matériaux diamagnétiques, l'orientation des moments élémentaires étant distribuées aléatoirement dans la matière, le matériau paramagnétique ne présente aucune aimantation macroscopique en l'absence de champ appliqué. En effet, les interactions entre les différents moments atomiques sont nulles pour cette classe de matériaux. L'aluminium *Al*, le baryum *Ba*, le calcium *Ca*, le platine *Pt* ou le manganèse *Mn* sont des exemples d'éléments paramagnétiques comme le montre le tableau I.2. Selon la théorie de Langevin, sous l'effet d'un champ magnétique externe appliqué, les moments magnétiques atomiques auront tendance à s'aligner selon ce champ, comme le montre la figure I.4, malgré l'agitation thermique qui tend,

elle, à atténuer ce phénomène. Ainsi, il en résulte une aimantation du matériau sous l'action de ce champ, dans le même sens que celui-ci. Cependant, l'amplitude de cette aimantation reste très faible et proportionnelle au champ appliqué. Il en résulte entre autres que ce type de matériaux ne présente pas d'aimantation rémanente.

Plusieurs sels de métaux de transition tels que les chlorures, les sulfates et les carbonates de manganèse, de chrome, de fer et de cuivre, dans lesquels les moments paramagnétiques résident sur le Cr^{3+} , le Mn^{2+} , le Fe^{2+} et le Cu^{2+} respectivement, et ceux sels hydratés tels que le potassium-chrome $KCr(SO_4)_2 \cdot 12H_2O$. Ces sels obéissent à la loi Curie, qui stipule que la susceptibilité magnétique χ est inversement proportionnelle à la température T , car les moments magnétiques sont localisés sur les ions métalliques, alors que la présence de molécules d'eau dans les sels hydratés garantit la faiblesse des interactions entre ces électrons sur les ions métalliques voisins. Les sels et les oxydes des éléments des terres rares (*lanthanides*) sont fortement paramagnétiques. Dans ces solides, les propriétés magnétiques sont déterminées par les $4f$ électrons. Ceux-ci sont étroitement liés au noyau et sont efficacement protégés par les électrons extérieurs du champ magnétique au site ionique, causés par les autres atomes du réseau cristallin, c'est-à-dire le champ cristallin. Les métaux des terres rares sont également paramagnétiques pour les mêmes raisons, mais si la température est réduite, beaucoup d'entre eux présentent des états ordonnés comme le ferromagnétisme.

En outre, le paramagnétisme est sensible à la température. En effet, la susceptibilité magnétique χ d'un matériau paramagnétique est inversement proportionnelle à la température T selon la loi de Curie :

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (I.12)$$

Où $C = \frac{n\mu_0\mu_B^2}{k_B}$ présente la constante de Curie et T est la température absolue. Une valeur typique par atome de $n = 6 \times 10^{28} m^{-3}$ pour un électron non apparié donne $C = 0,5K$ et une susceptibilité de $1,6 \times 10^{-3} m^3/kg$ à température ambiante. la susceptibilité magnétique diverge quand $T \rightarrow 0$, selon la loi de Curie.

Il a été établi plus tard que la loi de Curie est un cas particulier d'une loi plus générale, appelée la loi Curie-Weiss :

$$\chi = \frac{C}{T - \theta_p} \quad (I.13)$$

où

$$\theta_p = T_C = \frac{n_W \mu_0 \mu_B^2}{k_B} \quad (I.14)$$

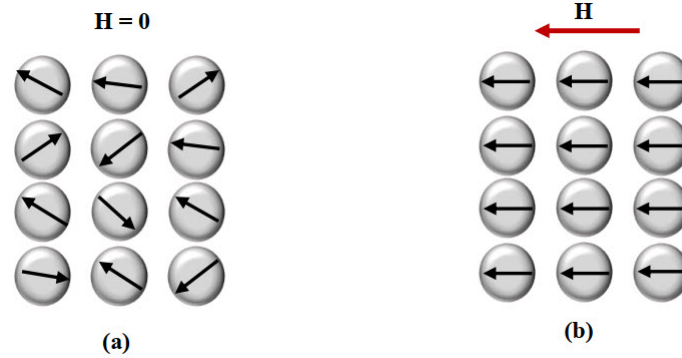


Figure I.4 – Paramagnétisme : (a) En l'absence du champ magnétique externe, (b) En présence du champ magnétique externe h .

	χ	μ_r
$\beta - Sn$	0.19×10^{-6}	1.00000
W	6.18×10^{-6}	1.00008
Al	1.65×10^{-6}	1.00002
Pt	21.04×10^{-6}	1.00026
Mn	66.10×10^{-6}	1.00083

Tableau I.2 – Susceptibilités et perméabilités de divers éléments paramagnétiques [2].

1.3.2 Magnétisme ordonné ou coopératif : magnétisme extraordinaire

L'existence du magnétisme ordonné est liée à la présence d'électrons non appariés organisés, c'est-à-dire en interaction mutuelle. Ce catégorie de magnétisme est classé en trois types suivants : le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme décrit par la figure I.5. Au contraire au magnétisme désordonné, il se caractérise par un réseau ordonné de moments magnétiques élémentaires atomiques. Cet ordre étant plus ou moins respecté selon l'agitation thermique, tous les éléments présentant un magnétisme ordonné verront leurs propriétés magnétiques varier selon la température. Pour chacune des trois types de magnétisme extraordinaire, il existe donc un intervalle de température en dehors duquel tous ces matériaux devient paramagnétique, c'est-à-dire un matériau désordonné [1, 37, 38].

Origine du magnétisme ordonné : Peu de matériaux sont le siège d'un magnétisme ordonné car ce type de magnétisme ne peut se mettre en place que dans certaines conditions spécifiques, en particulier au niveau du remplissage des couches électroniques. C'est l'orientation des spins électroniques qui est à l'origine de l'ordre dans ce type de matériau.

Ce comportement magnétique est le résultat des interactions entre les moments magnétiques

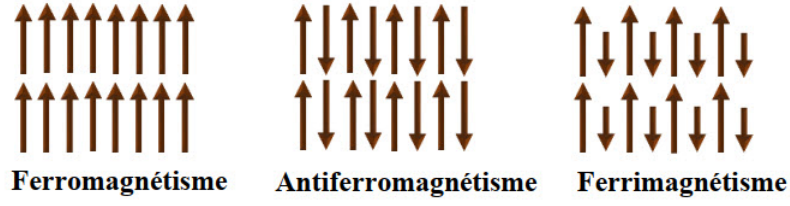


Figure I.5 – Différentes classes de magnétisme ordonné.

élémentaires. Ces interactions, désignées comme « champ moléculaire » interne selon la théorie de Weiss (1907), fut assimilée par celui-ci à un champ magnétique fictif qui s'ajoutent au champ appliqué aux moments magnétiques atomiques. Pierre Weiss a supposé à l'hypothèse que ce champ imaginaire est proportionnel à l'aimantation moyenne. Cette théorie s'applique à la fois aux électrons localisés et délocalisés. Un tel champ magnétique n'existe pas vraiment, mais il constitue un moyen utile d'approximer l'effet de l'interaction interatomique de Coulomb en mécanique quantique, en 1928, Heisenberg révèle la véritable nature du champ moléculaire en termes d'énergie. Ce concept se base sur l'indiscernabilité des électrons et le principe de Pauli. Un terme énergétique supplémentaire appelé « énergie d'échange » est introduit.

Heisenberg a décrit cette énergie d'échange par l'Hamiltonien :

$$H = E_{ex} = -2J_{ex}\vec{S}_i\vec{S}_j \quad (\text{I.15})$$

Où J_{ij} est appelée « intégrale d'échange », lorsque $J_{ex} > 0$, l'échange ferromagnétique conduit à E_{ex} minimum lorsque les spins sont parallèles et à un maximum lorsqu'ils sont antiparallèles. Si $J_{ex} < 0$, l'état d'énergie le plus bas correspond au spin antiparallèle. Et S_i, S_j sont des opérateurs décrivant les spins localisés sur deux atomes i et j voisins.

Selon la distance entre atomes et le degré de recouvrement des orbitales des deux atomes, deux cas peuvent se présenter.

- L'énergie d'échange est minimale lorsque les moments atomiques élémentaires sont dans le même sens : c'est le ferromagnétisme.
- L'énergie d'échange est maximale lorsque les moments atomiques élémentaires sont dans des sens opposés : c'est l'antiferromagnétisme et le ferrimagnétisme.

Le magnétisme ordonné correspond à la minimisation de l'énergie magnétique avec l'alignement des spins électroniques.

Ferromagnétisme : Les matériaux ferromagnétiques sont caractérisés par une aimantation spontanée M_s même en absence du champ magnétique extérieur. Comme il a été mentionné plus

Chapitre I. Généralités sur le magnétisme, les nanomatériaux, les propriétés magnétiques et hystérétiques

haut, ce fait est dû à l'alignement des moments magnétiques situés sur un réseau atomique. Sous l'effet de forces d'échange, les moments magnétiques sont alignés parallèlement comme le montre la figure I.5.

Pour les matériaux potentiellement ferromagnétiques, si la température augmente l'aimantation tombe chut à zéro à la température de transition appelée température de Curie (T_C), ces matériaux deviennent paramagnétiques au-dessus de leur point de Curie T_C comme le représente la figure I.24.

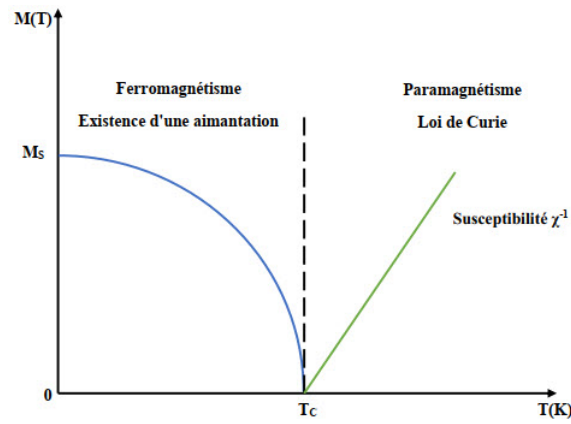


Figure I.6 – Transition ferromagnétisme-paramagnétisme.

Dans la phase paramagnétique désordonnée pour ($T > T_c$), la susceptibilité magnétique du matériau suit la loi de Curie-Weiss :

$$\chi = \frac{C}{T - T_c} \quad (\text{I.16})$$

Où C présente la constante de Curie. Sa valeur est d'ordre $1K$.

Au-dessous de cette température ($T < T_c$), le matériau ferromagnétique présente une aimantation spontanée due à l'alignement des moments magnétiques élémentaires dans la même direction. Dans cette gamme de températures, les valeurs de susceptibilité ($\chi \approx 50 - 10^5$) sont très élevées, positives et fortement dépendantes de la température. En effet, plus la température est importante, plus l'agitation thermique augmente et plus l'ordre ferromagnétique devient fragile. Les trois métaux de transition ferromagnétiques bien connues, ont tous une sous-couche $3d$ ou $4d$ incomplète comme le fer Fe , $T_c = 770^\circ C$, le nickel Ni , $T_c = 358^\circ C$, et le cobalt Co , $T_c = 1131^\circ C$, ou leurs alliages qui sont des exemples d'éléments ferromagnétiques.

Plusieurs métaux des terres rares présentent également un ferromagnétisme, notamment le gadolinium, $T_c = 293K$, le dysprosium $T_c = 85K$, le terbium $T_c = 219K$, l'holmium $T_c = 19K$,

l'erbium $T_c = 19,5K$ et le thulium $T_c = 32K$ [1].

Pour les amorphes ferromagnétiques il y'a une structure isolant non cristallin FeF_2 .

Antiferromagnétisme : Un antiferromagnétisme simple, dans lequel les moments magnétiques sont alignés de manière antiparallèle comme le montre sur la figure I.5, peut également être interprété sur la base du modèle de Weiss. Il y a deux façons d'envisager cela. La première consiste à diviser le matériau en deux sous-réseaux A et B, les moments sur un sous-réseau interagissant avec les moments sur l'autre sous-réseau avec un constant de couplage négatif, mais interagissant avec les moments sur leur propre sous-réseau avec un constant de couplage positif. Cela garantit que les moments magnétiques sur les deux sous-réseaux pointent dans des directions différentes. Une autre façon d'envisager le problème est de se baser sur les interactions du plus proche voisin. En cas d'interaction négative entre voisins proches, cela conduit à un antiferromagnétisme simple.

Les substances antiferromagnétiques, sont caractérisés par une température de transition T_N est appelée « point de Néel ». Au-dessus de cette température, le matériau adopte un comportement du type paramagnétique. Pour les températures inférieures, le matériau antiferromagnétique est globalement composé d'autant de moments atomiques dans un sens que dans l'autre. Cette structure peut être assimilable à la coexistence de deux sous-réseaux. Il en résulte une aimantation macroscopique nulle $M_s = 0$. Ainsi la susceptibilité magnétique est faiblement positive à cause des valeurs négatives des interactions d'échange entre les atomes voisins. Cette structure ne permet pas un alignement aisé des moments atomiques sous un champ magnétique appliqué.

Les substances antiferromagnétiques sont, par exemple ; le chrome, sous $T_N = 37^\circ C$ et le manganèse en dessous de $T_N = 100K$. Et il y'a des autres matériaux tels que l'hématite, les oxydes de cobalt et de nickel.

La loi Curie-Weiss s'applique également aux antiferromagnétiques dont la température est supérieure à la température de transition T_N . Cependant, le signe du terme Constant T_C est positif, de sorte que la loi devient :

$$\chi = \frac{C}{T + T_c} \quad (I.17)$$

Pour les amorphes antiferromagnétiques. Simpson a montré qu'il est impossible de créer une réelle subdivision en deux sous-réseaux dans un solide non cristallin, l'antiferromagnétisme ne pourra donc exister au-delà de quelques distances interatomiques à cause des perturbations créées par le désordre topologique [1, 36],

Ferrimagnétisme : Le ferrimagnétisme est un cas particulier d'antiferromagnétisme dans lequel les moments magnétiques sur les sous-réseaux A et B, tout en pointant dans des directions opposées, ont des spin différentes, présenté sur la figure 1.5. L'ordre ferrimagnétique a été suggéré pour la première fois par Luis Néel en 1948 (dans le modèle de champ moléculaire, Néel avait placé deux sous-réseaux d'aimantations différentes M_A et M_B) [35] pour expliquer le comportement des ferrites. à l'échelle macroscopique, les ferrimagnétiques se comportent de manière très similaire aux ferromagnétiques, si bien qu'il a fallu de nombreuses années avant de réaliser qu'il y avait une distinction. Ils ont une aimantation macroscopique spontanée en dessous de la température de Curie, au même titre que pour un matériau ferromagnétique, mais de moindre amplitude. En dessous de la température de Curie il existe une température pour laquelle l'aimantation spontanée du matériau est nulle à cause d'une compensation exacte de l'aimantation des deux sous-réseaux, cette température est appelée la température de compensation T_{com} .

Une fois encore, il existe pour les matériaux ferrimagnétiques un domaine de température de validité, en dessous d'une certaine température de transition. Les matériaux ferrimagnétiques sont en général des oxydes ou céramiques isolantes, le plus connu étant le ferrite (Fe_3O_4), bien que d'autres ferrites magnétiques de structure cubique $MF_{12}O_{19}$ (ont la structure cristalline de type "spinel" mentionnée) où M est un métal de transition comme le manganèse, le nickel, le cobalt, le zinc ou le magnésium soient largement utilisés, par exemple $M = Ni$ alors la structure est ($NiFe_{12}O_{19}$). Une autre classe de ferrites est constituée de ferrites hexagonales telles que la ferrite de baryum $BaFe_{12}O_{19}$ et la ferrite de strontium $SrFe_{12}O_{19}$. Ces ferrites sont magnétiquement dures et ont été largement utilisées comme matériaux d'aimants permanents. Ils présentent une anisotropie élevée. Leurs températures critiques T_C se situent généralement dans la plage $T_C = 500 - 800^\circ C$ [1, 36].

Autres magnétismes :

Superparamagnétisme : Le comportement des particules ferromagnétiques ou ferrimagnétiques à l'échelle nanométrique dont le volume V est si petit que le produit $K_u V$ est inférieur ou comparable à l'énergie thermique $k_B T$, dans ce cas, la somme totale des moments m_T de tous les atomes couplés fluctue aléatoirement comme celui d'un cristal présente un comportement paramagnétique au-dessus de sa température de Curie T_C . la susceptibilité magnétique suit une loi de Curie avec une valeur énorme de C . Le nom de superparamagnétisme a été inventé par Néel pour ce phénomène, qui est important pour les ferrofluides (liquides magnétiques qui sont en fait des suspensions colloïdales des particules ferrimagnétiques nanométriques) et dans le

magnétisme des roches.

Où K_u est une constante d'anisotropie magnétique (J/m^3), k_B est la constante de Boltzmann [1].

Hélimagnétisme : Jusqu'à présent, nous avons discuté des situations où l'interaction entre voisins est positive (ferromagnétique) ou négative (antiferromagnétique). Il existe une dans lequel nous considérons les interactions entre voisins proches et voisins immédiats. à titre d'exemple, nous examinerons le cas du dysprosium tel que traité par Enz [37] et plus tard par Nicklow [39]. Dans le plan de base, les moments sont tous alignés ferromagnétiquement, mais les plans de base successifs ont leurs moments inclinés à un angle de $0^\circ \leq \theta \leq \pi$ par rapport aux moments du plan de base suivante. Cela donne une structure magnétique hélicoïdale appelée le hélimagnétisme, qui est une aimantation nulle ou très faible à cause de leur orientation du moment à toutes les directions de plan.

- Si $\theta = 0$ Orientation parallèle des moments c-à-d : Ferromagnétisme.
- Si $\theta = \pi$ Orientation antiparallèle des moments c-à-d : Antiferromagnétisme.

Spéromagnétisme : Le spéromagnétisme était démontré dans les composés amorphes ioniques, en particulier un gel de $Fe(OH)_3$. C'est un amorphe caractérisé par une structure dans laquelle les spins sont orientés dans des directions aléatoires, de manière isotrope qui sont corrélés tout au plus entre proches voisins. La distribution de probabilité $P(\psi)$ pour qu'un spin réalisait un angle $-\pi \leq \psi \leq \pi$ avec une direction donnée est proportionnelle à la fonction $\sin(\psi)$. Parmi les amorphes spéromagnétiques FeF_3 , BaO , et B_2O_3 [40, 41].

Aspéromagnétisme : L'aspéromagnétisme est un amorphe ionique caractérisé par une structure différente que du spéromagnétisme par une anisotropie longitudinale des moments magnétiques, avec quelques directions privilégiées. Aucun amorphe ionique ne présenté jusqu'à présent ce dernier type de magnétisme, observé notamment sur YFe_3 [41].

Spérimagnétisme : Le spérimagnétisme est généralement observé dans les matériaux ferrimagnétiques amorphes, comprend deux espèces magnétiques (ou plus) avec les moments d'au moins une espèce gelée dans des orientations aléatoires en dessous de la température critique. Parmi les différents alliages amorphes il y'a $Co - Tb$, $DyCo_3$ et $NdCo_3$ [42].

Métamagnétisme : Le métamagnétisme est caractérisé avec une augmentation soudaine de l'aimantation d'une substance avec une petite modification d'un champ magnétique appliqué

à l'extérieur. Le comportement métamagnétique peut avoir des causes physiques très différentes selon les types de métamagnétiques. Le métamagnétisme peut être associé à une transition de phase du premier ordre, à une transition de phase continuée à un point critique (classique ou quantique), ou à des croisements au-delà d'un point critique qui n'impliquent pas de transition de phase du tout. Ces explications physiques très différentes entraînent parfois une confusion quant à la signification du terme "métamagnétique" dans des cas spécifiques [43].

2 Morphologie des nanomatériaux

2.1 Taille et forme des nanomatériaux

Selon leur taille et leur dimension, les nanomatériaux peuvent être classés en quatre catégories : (1) les grappes et les particules zerodimensionnelles ($0D$), (2) les nanotubes et les nanofils unidimensionnels ($1D$), (3) les nano-plates et les couches bidimensionnelles ($2D$), et (4) les faisceaux tridimensionnels ($3D$) de nanofils et de nanotubes ainsi que les multicouches. Ils peuvent exister sous forme simple, fusionnée, agrégée ou agglomérée, avec des formes sphériques, tubulaires, ellipsoïdales et irrégulières.

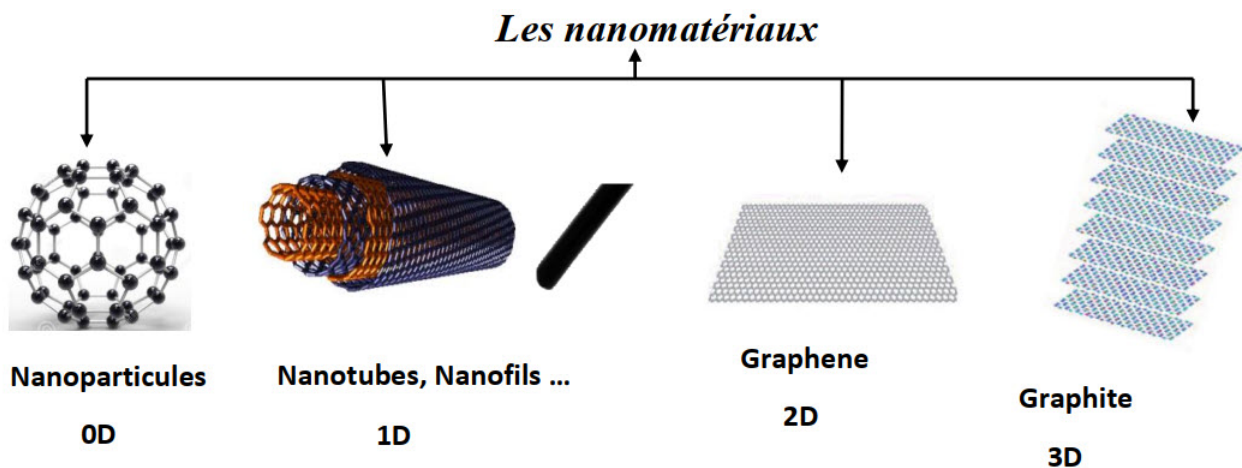


Figure I.7 – Différentes formes des nanomatériaux.

2.1.1 Dimensionnel zéro

Les nanomatériaux à dimension zéro ($0D$) sont des matériaux dont toutes les dimensions (x , y , z) sont mesurées à l'échelle nanométrique ($1 - 100\text{ nm}$). La représentation la plus cou-

rante des nanomatériaux $0D$ sont les nanoparticules sphériques [39] est tracée dans la figure I.7. Cependant, des formes cubiques et polygonales avec des nano-dimensions sont également trouvées dans cette classe. Ils peuvent être amorphes, monocristallins ou polycristallins. Les matériaux uniformes avec des nano-dimensions, tels que les molécules, les clusters, les fullènes, les anneaux, les particules et les grains, sont considérés comme faisant partie de cette classe. Les nanoparticules métalliques, telles que les nanoparticules d'argent et d'or, les points quantiques avec des réseaux de particules uniformes, les réseaux de particules hétérogènes, les points quantiques core-shell, les sphères creuses et les nano-lentilles sont les exemples courants de cette classe [44]. Ils peuvent également être en céramique et en polymères, avec des formes variées. et formes diverses.

2.1.2 Unidimensionnel

Les nanomatériaux unidimensionnels ($1D$) possèdent une taille nanométrique dans deux directions, mais une longueur plus importante ($> 100\text{ nm}$) dans la troisième, ce qui conduit à des nanomatériaux en forme d'aiguille comme le montre la figure I.7. Les nanotubes de carbone (*CNT*), les nanofils de métaux ou d'oxydes métalliques, les nanofils ou nanofibres de polymères et les matériaux hybrides sont les représentants courants des nanomatériaux $1D$ [45]. Les nanomatériaux $1D$ offrent des propriétés avantageuses uniques en raison de leur caractéristique structurelle inhérente à haut rapport d'aspect, associée à des propriétés mécaniques, électriques et optiques supérieures.

2.1.3 Bidimensionnel

Les nanomatériaux bidimensionnels ($2D$) sont des feuilles atomiquement fines de matériaux composés par une seule dimension se situe à l'échelle nanométrique et dont les deux autres dimensions ne sont pas nanométriques donnée dans la figure I.7. Les nanofilms, les nano-couches et les nano-revêtements sont des représentations courantes des nanomatériaux $2D$ qui présentent des formes semblables à des plaques. Le graphène est l'exemple le plus récent de cette classe, qui est une couche de carbone unique de la structure de graphite en nid d'abeilles [46].

2.1.4 Tridimensionnel

Les nanomatériaux tridimensionnels ($3D$) sont des matériaux qui ne sont confinés à l'échelle nanométrique dans aucune dimension. Ils possèdent trois dimensions arbitraires supérieures à 100 nm . Cependant, les nanomatériaux $3D$ ont une structure nanocristalline ou impliquent la

présence de caractéristiques à l'échelle nanométrique. En ce qui concerne la structure nanocristalline, les nanomatériaux en vrac peuvent être composés de multiples arrangements de cristaux de taille nanométrique dans différentes orientations. Les nanomatériaux 3D peuvent contenir des dispersions de nanoparticules, des faisceaux de nanofils et de nanotubes ainsi que des multicouches. Tous ces nanomatériaux de quatre tailles et formes différentes sont clairement représentés sur la figure I.7.

2.1.5 Effets de Surface

Les nanomatériaux possèdent une grande fraction d'atomes de surface par unité de volume. Cette augmentation spectaculaire du rapport entre les atomes de surface et les atomes intérieurs dans les nanomatériaux est à l'origine des changements importants dans les propriétés physiques et autres matériaux. Lorsque la taille de l'objet est réduite à l'échelle nanométrique, la proportion d'atomes de surface augmente, ce qui donne lieu à des sites de surface beaucoup plus réactifs. Cela peut être éclairci par un exemple : si nous découpons un cube de 111 cm en plusieurs morceaux égaux aboutissant à des cubes de $0.1\text{ }0.1\text{ }0.1\text{ mm}$ chacun, le volume total de tous les petits cubes sera le même que celui du cube de départ, mais les surfaces de tous les cubes auront 100 fois plus d'aire que celle du cube de départ. Ainsi, les nanomatériaux possèdent un rapport surface/volume élevé, ce qui leur permet d'interagir plus efficacement avec l'environnement que les matériaux en vrac. De plus, les atomes intérieurs de tout matériau sont plus coordonnés et plus stables que les atomes de surface en raison du plus grand nombre de liaisons disponible [47]. Cependant, aux coins et aux bords, les atomes de surface ont moins de coordination, ce qui les rend moins stables et plus réactifs que les atomes intérieurs. Une autre conséquence de cette moindre stabilité des atomes ou des molécules à la surface est le point de fusion plus bas des couches de surface [48]. Plus une particule est petite, plus la fraction des atomes à la surface est grande et plus l'énergie de liaison moyenne par atome est élevée. Le rapport surface/volume s'échelonne avec l'inverse de la taille, et donc d'autres propriétés telles que la température de transition de phase et la solubilité obéissent également à la même loi d'échelle.

2.2 Nanofils

2.2.1 Introduction

Récemment, les matériaux nanostructures unidimensionnels (1D), tels que les nanotubes, les nanofibres et les nanofils, ont suscité un intérêt croissant et trouvé de nombreuses applications

dans divers champs de recherche tels que le nanoélectronique et les cellules photovoltaïques, les capteurs, l'optique de laser, le stockage d'informations, le biomédical, la catalyse, la conversion et le stockage de l'énergie [49, 50].

Les nanofils, qui constituent l'un des nanomatériaux les plus classiques, sont des nanostructures unidimensionnelles en forme de fil ou de tige et ont fait l'objet d'un développement et d'une recherche importante au cours des dernières années. En général, le nanofil désigne une structure solide unidimensionnelle avec un rapport d'aspect relativement élevé (longueur par rapport au diamètre), tandis que le nanorod désigne un rapport d'aspect relativement faible (par exemple, un rapport d'aspect inférieur à 10, même s'il n'est pas défini avec précision). À ses débuts, la recherche sur les nanofils s'est principalement concentrée sur les matériaux semi-conducteurs tels que les nanofils de silicium (Si) [51], qui ont pu être synthétisés par une technique bien connue appelée procédé VLS (vapor-liquid-solid) développée par Wagner et Ellis [52]. L'or (Au) est souvent utilisé comme catalyseur pour faire croître les nanofils de Si, ainsi que le cuivre (Cu), le titane (Ti), le nickel (Ni) et l'aluminium (Al). La plupart des nanofils ont été préparés en utilisant un modèle, même si des méthodes sans modèle sont possibles, comme l'oxydation thermique [53] ou le procédé VLS mentionnée ci-dessus. Les molécules stabilisatrices de surface telles que les tensioactifs ou les polymères peuvent être utilisées comme modèles mous [54], tandis que les matériaux solides poreux tels que l'oxyde d'aluminium anodique (AAO) [55], les oxydes méso-poreux (MOs) [56], le polycarbonate (PC) [57] ou les nanotubes de carbone (CNTs) [58], peuvent être utilisés comme modèles durs. Les MOs et les CNTs sont moins couramment utilisés, comparés aux modèles AAO et PC, qui sont largement utilisés à cause de leur caractère hautement ordonné et de leur proximité. Largement utilisée, en raison de leur distribution très ordonnée et très compacte de pores de taille nanométrique. En outre, la fabrication et la production de ces modèles AAO ou PC sont relativement simples et peu coûteuses, et ces membranes modèles sont commercialisées et facilement accessibles. Les caractéristiques structurelles de ces gabarits, telles que le diamètre des pores, la distance entre les pores, l'épaisseur de la matrice, la densité des pores, la porosité, etc pour obtenir la fonction et la propriété souhaitées. De plus, les gabarits en AAO ou en polycarbonate peuvent être facilement retirés en utilisant une méthode de gravure chimique pour libérer les nanofils, par exemple avec une solution d'hydroxyde de sodium ($NaOH$) pour attaquer la membrane en AAO ou avec du dichlorométhane pour dissoudre la membrane en PC. Un autre avantage ou caractéristique unique de l'utilisation d'une matrice AAO ou PC est qu'il s'agit de l'une des techniques les plus utiles pour fabriquer une structure de réseau de nanofils alignés verticalement, ce qui permet d'obtenir une surface beaucoup plus grande qui peut être avantageuse pour diverses applications telles que la détection, la catalyse et la nano-modélisation. Outre

la méthode d'électrodéposition la plus largement utilisée pour la synthèse de nanofils dans des gabarits en AAO ou PC, d'autres méthodes telles que l'injection sous pression, le dépôt chimique en phase vapeur (CVD), l'hydrothermie et lithographie ont également été utilisées pour préparer des nanofils aux structures complexes [59, 60]. De plus, les nanofils peuvent être préparés avec différents matériaux tels que métal, polymère, oxyde métallique et semi-conducteur [61–63] comme le montre la figure I.8.

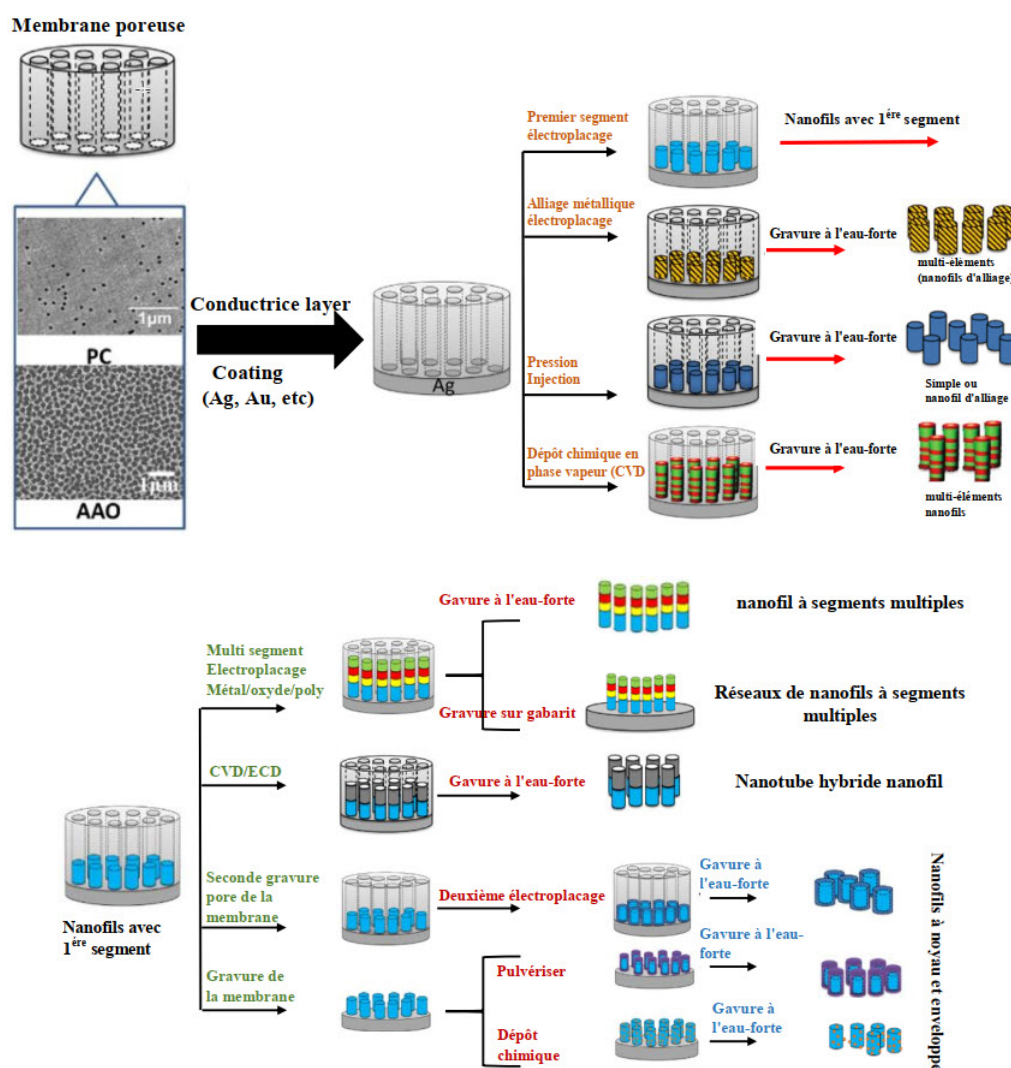


Figure I.8 – Illustration schématique de la synthèse de nanofils multi-composants assistée par un modèle.

2.2.2 Nanofils à structure alternés ou multi-segmentés

Récemment, divers nanofils multisegmentés ont été conçus et synthétisés, en raison de leur capacité à remplir plusieurs fonctions simultanément de manière plus compacte et efficace. En ajustant les paramètres de synthèse et en sélectionnant différentes méthodes de synthèse, différentes structures de nanofils multisegmentés ont été fabriquées, telles que métal-métal, métal-polymère, métal-oxyde métallique, métal-semi-conducteur, oxyde-semi-conducteur ou polymère-semi-conducteur. Des matériaux alternés où des nanofils conçus à dessein avec différents segments et matériaux, de manière délibérée ou aléatoire, ont été développés pour obtenir une multifonctionnalité. Par exemple, le segment *Ni* peut fournir une capacité magnétique, le segment *Au* peut rendre le nanofil plus conducteur et biocompatible, le polymère conducteur tel que le PPy peut fournir une capacité de détection, tandis que le segment *ZnO* possède une propriété optique ou photocatalytique améliorée, ce qui est prometteur pour les applications de cellules solaires et le traitement des polluants [64]. Les différents types de segments et de multimatériaux peuvent être combinés de diverses manières pour produire une quantité presque illimitée de nanofils hybrides, offrant de nombreuses possibilités pour des applications telles que la détection, l'actionnement, l'administration de médicaments, le stockage d'énergie, l'électrocatalyse, ainsi que l'assemblage et l'intégration à l'échelle nanométrique.

Parmi les méthodes les plus utilisées pour synthétiser des nanofils multi-segmentés : **l'électrodéposition** où **l'électroplacage** sont les plus utilisées pour synthétiser des nanofils multisegmentés, et le procédé basé sur le dépôt chimique en phase vapeur (CVD) est largement utilisé pour la synthèse de nanofils semi-conducteurs (voir les figures I.8 et I.9).

2.2.3 Nanofils multi-élémentés ou nano-composites

Les nanofils à éléments multiples sont un autre type de nanofils à composants multiples, y compris les nanofils alliés tels que les alliages binaires, ternaires ou multiples, les nanofils d'oxyde mixte ou d'oxyde dopé, et les nanofils à composition multiple ou à structure hybride [65].

Électrodéposition : est la méthode la plus couramment utilisée pour fabriquer des nanofils et des réseaux de nanofils multiéléments, et **la méthode de réduction chimique** (voir les figures I.8 et I.9).

2.2.4 Nanofils à structure cœur-coquille

Au cours des deux dernières décennies, les nanofils cœur-coquille ont attiré de plus en plus d'attention car ils présentent plusieurs avantages : (1) Différents matériaux peuvent être dépo-

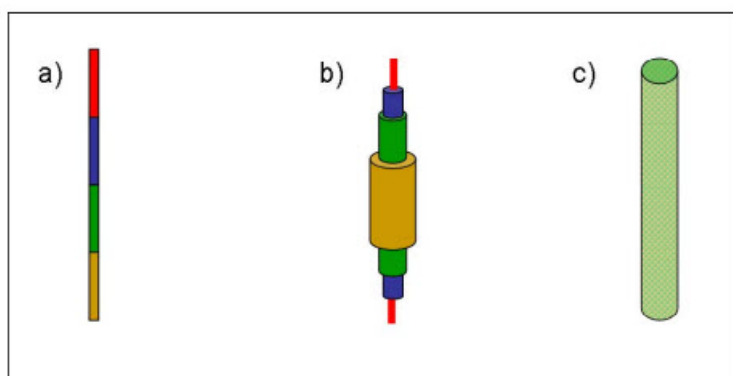


Figure I.9 – Principales types de nanofils hybrides à base de polymères conjugués : a) nanofils à couches alternés, b) nanofils cœur-coquille et c) nanofils multi-éléments.

sés comme coquille sur le cœur afin d'obtenir des propriétés accrues et des fonctions variées ;
(2) Certains matériaux coûteux, comme le platine, peuvent être déposés sur des matériaux peu coûteux (par exemple, le nickel) afin d'en réduire le coût, tout en présentant des performances égales ou supérieures ; (3) Des matériaux biocompatibles (comme l'or) peuvent être déposés ou assemblés comme coquille sur des matériaux de cœur magnétique (comme le nickel-cadmium ou l'oxyde de fer) pour l'administration de médicaments et la séparation ou la purification magnétique très efficaces. Il existe de nombreuses méthodes de synthèse des nanofils cœur-coquille en fonction de leurs structures et de leurs matériaux, comme l'électrodéposition, la réduction chimique, la pulvérisation, le dépôt de couches atomiques (ALD), la diffusion thermique et la lithographie coaxiale. Il existe deux types de nanofils métal-polymère :

- Polymère en surface (gaine) et métal au cœur.
- Métal en surface (gaine) et polymère au cœur.

Électrodéposition : est la première méthode qui a été développée pour fabriquer des nanofils noyau-coquille. Diverses nanoparticules métalliques peuvent être déposées sur la surface des nanofils électrodéposés en tant que coquille en utilisant **la méthode de réduction chimique**, formant une structure unique de noyau de nanofil et de coquille de nanoparticules (voir les figures I.8 et I.9), et il y'a **la pulvérisation cathodique** qui est une méthode conventionnelle mais efficace pour préparer des nanofils cœur-coquille.

2.3 Nanotubes

2.3.1 Introduction

Les nanotubes font partie de la famille structurale des fullerènes, qui comprend également les buckyballs. Alors que les buckyballs sont de forme sphérique, un nanotube est cylindrique, avec au moins une extrémité typiquement recouverte d'un hémisphère de la structure buckyball. Leur nom provient de leur taille, puisque le diamètre d'un nanotube est de l'ordre de quelques nanomètres (environ 50000 fois moins large qu'un cheveu humain), tandis que leur longueur peut atteindre plusieurs millimètres. Les nanotubes de carbone ont trouvé de diverses applications dans de nombreux domaines de recherche, et parmi ces applications, l'émission de champ, la conductivité thermique, le stockage d'énergie, les propriétés conductrices et les applications biomédicales.

Des chercheurs de l'université de Cincinnati (UC) ont mis au point un procédé permettant de construire des réseaux de nanotubes de carbone alignés extrêmement longs. Ils sont parvenus à produire des nanotubes de carbone de 18 *mm* de long qui pourrait être filé en nanofibres [66, 67]. Les nanotubes peuvent être mélangés ou incorporés à d'autres matériaux de matrice tels que les polymères et former des structures nanocomposites, en raison de leur grande résistance, de leur faible poids et de leur facilité de fonctionnalisation de surface. Il existe deux principaux types de nanotubes : les nanotubes à simple feuillet (*SWNT*) comme la figure I.10 et les nanotubes à multi feuillets (*MWNT*) comme la figure I.11 [68].

La théorie suggère que les nanotubes de carbone ont une variété de propriétés utiles, et les expériences pour tester ces prédictions commencent tout juste à être possibles. Les nanotubes de carbone sont des nanostructures uniques dotées de propriétés électroniques et mécaniques remarquables. L'intérêt de la communauté des chercheurs s'est d'abord porté sur leurs propriétés électroniques exotiques, puisque les nanotubes peuvent être considérés comme des prototypes de fil quantique unidimensionnel. À mesure que d'autres propriétés utiles ont été découvertes, notamment la résistance, l'intérêt s'est accru pour les applications potentielles. Les nanotubes de carbone pourraient être utilisés, par exemple, dans l'électronique de taille nanométrique ou pour renforcer les matériaux polymères.

On considère un nanotube idéal tout réseau hexagonale d'atomes de carbone qui a été enroulé pour former un cylindre sans soudure. D'un diamètre d'à peine un nanomètre, le cylindre peut mesurer des dizaines de micromètres de long, est "coiffée" de la moitié d'une molécule de fullerène. Les nanotubes à simple feuillet peuvent être considérés comme la structure cylindrique fondamentale, et ils constituent les éléments constitutifs des nanotubes à multi feuillets et des réseaux ordonnés de nanotubes à feuillet unique appelés cordes.

2.3.2 Nanotube de carbone à simple feuillet

Un nanotube de carbone à simple feuillet est une feuille de graphite d'un atome d'épaisseur (appelée graphène) enroulée en un cylindre sans soudure dont le diamètre est de l'ordre du nanomètre comme le montre la figure I.10. On obtient ainsi une nanostructure dont le rapport longueur/diamètre dépasse 10000. Ces molécules de carbone cylindriques possèdent de nouvelles propriétés qui les rendent potentiellement utiles dans une grande variété d'applications en nanotechnologie, en électronique, en optique et dans d'autres domaines de la science des matériaux. Elles présentent une résistance extraordinaire et des propriétés électriques uniques, et sont des conducteurs de chaleur efficaces. Des nanotubes inorganiques ont également été synthétisés [68].

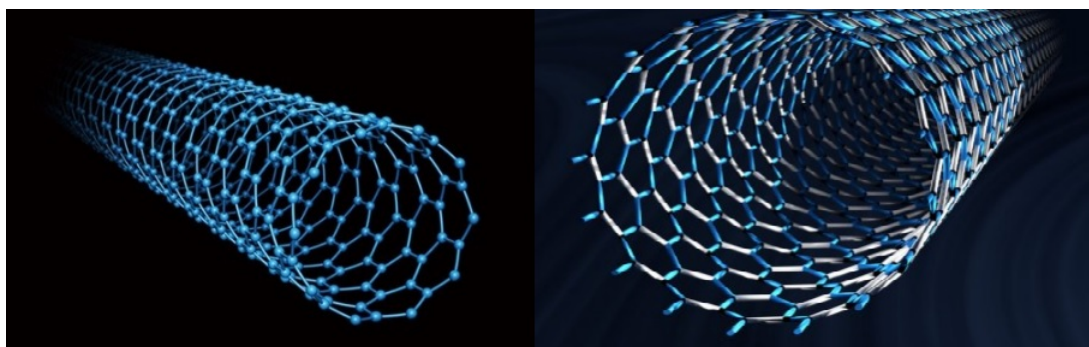


Figure I.10 – Nanotubes de carbone à simple feuillet.

2.3.3 Nanotube de carbone à multi feuillets

Les nanotubes multi feuillets (MWNT) sont constitués de plusieurs couches de graphite enroulées sur elles-mêmes pour former un tube comme le montre la figure I.11. Deux modèles peuvent être utilisés pour décrire ces structures. Le modèle de la poupée russe où les feuilles de graphite sont disposées en cylindres concentriques. Le modèle du parchemin où une seule feuille de graphite est enroulée sur elle-même, ressemblant à un rouleau de parchemin. La distance entre les couches dans les nanotubes multi feuillets est proche de celle entre les couches de graphène dans le graphite, soit environ $3,3 \text{ \AA}$. La place particulière des nanotubes de carbone à double paroi (DWNT) doit être soulignée ici car ils combinent une morphologie et des propriétés très similaires à celles des (SWNT), tout en améliorant considérablement leur résistance aux produits chimiques. Dans le cas des (SWNT), la fonctionnalisation covalente va rompre certaines doubles liaisons $C = C$, laissant des "trous" dans la structure du nanotube et modifiant ainsi ses propriétés mécaniques et électriques. Dans le cas des (DWNT), seule la paroi externe est

modifiée. La synthèse des (DWNT) à l'échelle de la gramme, proposée pour la première fois en 2003 par la technique CCVD, à partir de la réduction sélective de solutions solides d'oxydes dans du méthane et d'hydrogène. Les nanotubes à multi feuillets (MWNT) peuvent être considérés comme un groupe de nanotubes à parois simples [68].

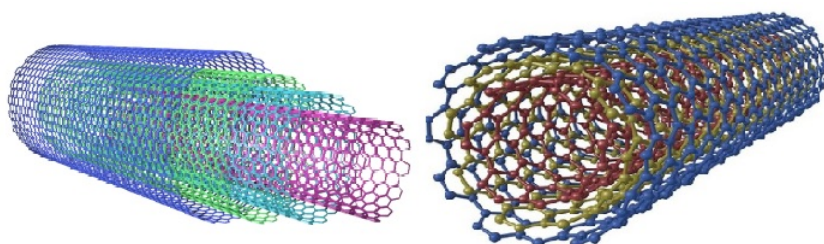


Figure I.11 – Nanotubes de carbone à multi feuillets.

3 Propriétés magnétiques des nanomatériaux

Par rapport aux matériaux en vrac, les nanomatériaux présentent une variété de comportements magnétiques inhabituels dus aux effets de surface ou d'interface, notamment la rupture de symétrie, l'environnement électronique, ou le transfert de charge et l'interaction magnétique comme le montre la figure I.12. De plus, en raison du rapport surface/air/volume important des nanostructures, les atomes qui les composent subissent un couplage magnétique différent avec les atomes voisins par rapport aux matériaux en vrac [69]. Le magnétisme des particules fines est également basé sur la structure de domaine magnétique des matériaux ferromagnétiques. Les particules ferromagnétiques plus petites que la taille critique sont appelées particules à domaine unique qui présentent un magnétisme uniforme, tandis que les particules plus grandes à domaine multiple possèdent un magnétisme non uniforme [70]. La taille critique du domaine unique est affectée par plusieurs facteurs tels que la valeur de la saturation magnétique, l'anisotropie cristalline longitudinal, les interactions d'échange, l'énergie de surface ou de paroi de domaine, et la forme des particules. La réaction des matériaux ferromagnétiques sur un champ appliqué est caractérisée par deux paramètres principaux : la rémanence et la coercivité, dont celle des matériaux magnétiques dépend fortement de la taille des particules. Lorsque la taille des particules est réduite, la coercivité augmente jusqu'à un maximum à la taille d'un seul domaine, puis diminue pour les particules très petites en raison des effets thermiques et devient nulle à la taille des particules super-paramagnétiques.

Ainsi, les nanomatériaux peuvent devenir super-paramagnétiques, même si les matériaux en vrac correspondants ne sont pas magnétiques. Par exemple, les nanoparticules de Fe_3O_4 ont montré un comportement super-paramagnétique, même si l'oxyde de fer (Fe_3O_4) est ferromagnétique. L'énergie de surface exceptionnelle et l'orientation inversée des électrons de spin des nanoparticules de Fe_3O_4 sont responsables de ce phénomène [71]. Les nanoparticules super-paramagnétiques ne sont pas magnétiques lorsqu'elles se trouvent dans un champ magnétique nul, mais elles se magnétisent rapidement après l'application d'un champ magnétique externe. Lorsqu'elles sont inférieures au diamètre super-paramagnétique, les nanoparticules peuvent revenir rapidement à un état non magnétisé après le retrait d'un aimant externe. Il existe plusieurs matériaux cristallins qui présentent un ferromagnétisme, comme le Fe , le Co ou le Ni . Parmi ces derniers, l'oxyde de ferrite-magnétite (Fe_3O_4) est le plus utilisé sous forme de nanoparticules super-paramagnétiques pour toutes sortes d'applications biologiques [72].

3.1 Domaines magnétiques des nanomatériaux

Les matériaux ferromagnétiques sont généralement constitués en domaines magnétiques appelés domaines de Weiss séparés par des parois de Bloch. Si le coût énergétique de la formation des parois est faible comparé à la différence d'énergie entre l'état mono-domaine et l'état multi-domaine, alors une structure multi-domaine est énergétiquement favorable. Plus la taille de l'objet magnétique est petite, plus il aura tendance à être mono-domaine expliquée dans la figure I.12. En dessous d'une taille critique, l'existence d'une paroi n'est plus énergétiquement favorable et le matériau magnétique présente une nouvelle structure magnétique appelée macro-spin. En effet, la transition vers l'état de domaine unique est manifestement un effet dépendant de la taille, qui peut être sondée par un certain nombre de techniques expérimentales. La figure I.13 illustre qualitativement la dépendance du champ coercitif H_c par rapport à la taille des particules. En dessous d'une taille critique (qui dépend du matériau), le champ H_c est nul et un comportement super-paramagnétique (voir ci-dessous) est observé, ce qui indique l'état de l'aimantation à domaine unique. Le pic autour de la taille critique est large en raison de la distribution de la taille des particules. La taille critique à laquelle une particule devient mono-domaine est le résultat de la compétition entre le couplage d'échange et l'énergie magnétostatique, et dépend par conséquent de la géométrie, de l'anisotropie et du moment magnétique de saturation M_S de la particule. Pour une sphère magnétique à cellule cubique, la première estimation de cette taille critique a été proposée par Kittel [73] en comparant l'énergie nécessaire pour créer une paroi de Bloch et la réduction de l'énergie magnétostatique par la création de domaines. Si l'anisotropie longitudinale magnétique est faible, le rayon critique

I.3 Propriétés magnétiques des nanomatériaux

au-delà duquel la nanoparticule est multi-domaines s'écrit alors :

$$R_c \approx \frac{9\sigma_\omega}{4\pi M_s^2} \quad (\text{I.18})$$

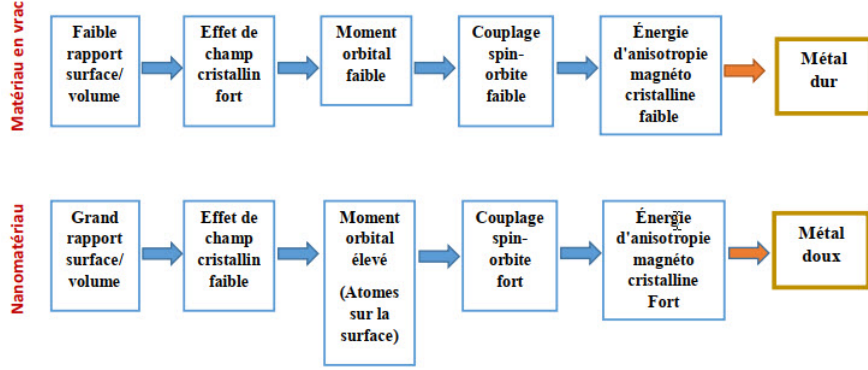


Figure I.12 – Évaluation des différents effets de taille sur le comportement magnétique d'un métal de transition à l'état massif et à l'échelle nanométrique.

Où $\sigma_\omega = 4\sqrt{AK}$ présente l'énergie de la surface d'une paroi de Bloch et M_s est l'aimantation de saturation, $A = J_{ex}S^2/a$ est la constante de rigidité d'échange et J_{ex} l'interaction d'échange et a le paramètre de maille du réseau cubique. Typiquement, R_c est de 15 nm pour le fer et de 58 nm pour le cobalt. Cependant selon Brown [74], cette approche ne garantit pas l'existence d'un seul domaine et ne permet pas une évaluation précise du rayon critique. En effet Kittel a comparé l'énergie d'une particule mono-domaine à celle d'une particule multi-domaine aux structures très spécifiques. Son approche ne prend donc pas en compte aucune autre structure possible qui pourrait avoir une énergie différente. Kittel a donc prouvé qu'il est possible pour une particule d'être un domaine unique au-delà d'un certain rayon, mais il n'a pas trouvé de rayon au-delà duquel la particule est nécessairement mono-domaine [75]. En utilisant un formalisme emprunté au micromagnétisme, Brown a d'abord déterminé un rayon R_0 en dessous duquel l'état mono-domaine est celui de plus faible énergie.

$$R_0 = 3.6055 \sqrt{\frac{2A}{4\pi M_s^2}} \quad (\text{I.19})$$

Puis il a déterminé deux rayons critiques au-delà desquels l'état de plus basse énergie est nécessairement multi-domaine. Dans le cas d'une faible constante principale d'anisotropie K_1 :

$$R_1 = \frac{4.5292\sqrt{2A}}{\sqrt{4\pi M_s^2 - 5.6150K_1}} \quad (\text{I.20})$$

Chapitre I. Généralités sur le magnétisme, les nanomatériaux, les propriétés magnétiques et hystérétiques

	$M_s(emu/cm^3)$	$K(10^4 erg/cm^3)$	$A(erg/cm^3)$	$R_c(nm)$	$R_0(nm)$	$R_1(nm)$	$R_3(nm)$
<i>Co</i>	1430	430	1	58.1	15.1	51.4	146
<i>Fe</i>	1710	45	1	13.1	8.4	11	116.5
<i>Ni</i>	483	4.5	1	52.1	29.8	39.1	412.9

Tableau I.3 – Valeurs du rayon critique de Kittel et Brown pour différents matériaux [77].

Dans le cas d'une constante d'anisotropie K_2 plus forte :

$$R_2 = \frac{9\sqrt{2A(K + 8\pi M_s^2)}}{8(3\sigma - 2)M_s^2} \quad (I.21)$$

Avec $\sigma = 0.785398$.

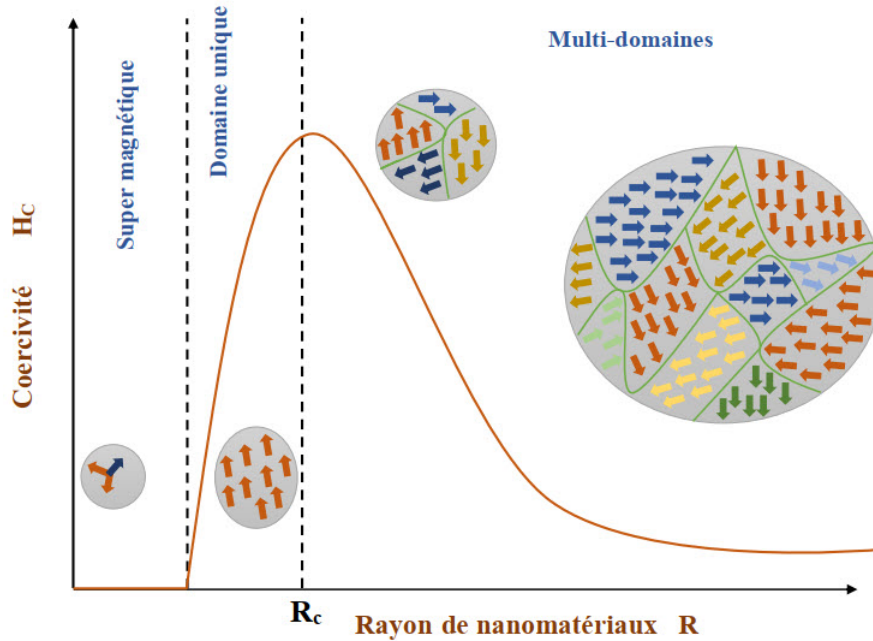


Figure I.13 – Illustration schématique des relations coercivité-taille des petites particules.

Gubin [76] fournit les valeurs R_C , R_0 , R_1 et R_2 pour différents matériaux :

Néanmoins, il a été montré que ces rayons critiques peuvent varier en fonction de la température et du champ extérieur [77].

3.2 Interactions d'échanges magnétiques

L'origine du champ effectif H est l'interaction d'échange, qui reflète la répulsion de Coulomb de deux électrons voisins, généralement sur des atomes voisins, agissant en conjonction avec

le principe de Pauli, qui interdit les deux électrons pour entrer dans le même état quantique. Les électrons ne peuvent pas être au même endroit s'ils ont le même spin. Il y a une différence d'énergie entre les $\uparrow_i\uparrow_j$ et $\uparrow_i\downarrow_j$ configurations des spins des atomes voisins i, j . L'échange interatomique dans les isolants est généralement plus faible que l'échange ferromagnétique intra-atomique entre les électrons d'un même atome, ce qui conduit à la première règle de Hund.

Le principe de Pauli interdit à plus d'un électron de trouer dans un état quantique, désigné par un ensemble particulier de nombres quantiques. Les électrons sont indiscernables, donc l'échange entre deux électrons doit donner la même densité $|\Psi(1, 2)|^2 = |\Psi(2, 1)|^2$. De façon générale, les électrons sont des fermions, la seule solution est que la fonction d'onde totale des deux électrons soit antisymétrique [1] :

$$\Psi(1, 2) = -\Psi(2, 1) \quad (\text{I.22})$$

La fonction d'onde totale est le produit des fonctions de l'espace et des coordonnées de spin $\varphi(r_1, r_2)$ et $\phi(s_1, s_2)$. Pour comprendre l'interaction d'échange, nous avons traité l'exemple simple de la molécule d'hydrogène H_2 avec deux atomes ayant chacun un électron dans un $1s$ – *orbital* hydrogénique $\Psi_i(r_i)$ donne une idée de la physique des échanges. L'équation de Schrodinger est la suivante $\mathcal{H}(r_1, r_2)\Psi(r_1, r_2) = \varepsilon\Psi(r_1, r_2)$ où, on néglige les interactions entre les électrons,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \right] \Psi(r_1, r_2) = \varepsilon\Psi(r_1, r_2) \quad (\text{I.23})$$

Il y a deux orbitales moléculaires, une orbite de liaison spatialement symétrique φ_s , avec une charge électronique empilée entre les atomes, et une orbite de liaison spatialement antisymétrique φ_a ayant un plan nodal sans charge à mi-chemin entre elles. Les liaisons chimiques qui impliquent des fonctions d'ondes hybrides des électrons d'atomes voisins sont généralement classées de cette manière :

$$\varphi_s = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left(\Psi_1 + \Psi_2 \right) \quad \text{et} \quad \varphi_a = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left(\Psi_1 - \Psi_2 \right) \quad (\text{I.24})$$

Où Ψ_1 et Ψ_2 sont les composantes spatiales des fonctions d'onde individuelles des électrons 1 et 2 respectivement. Les fonctions d'onde $\Psi_1(r_1)$ et $\Psi_2(r_2)$ sont les solutions de l'équation de Schrodinger pour chaque atome individuel.

$$\begin{aligned}
 S &= 1; & M_S &= 1, 0, -1 \\
 \chi_s &= |\uparrow_1, \uparrow_2\rangle; & (1/\sqrt{2}) [|\uparrow_1, \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1, \uparrow_2\rangle]; & |\downarrow_1, \downarrow_2\rangle \\
 S &= 0; & M_S &= 0 \\
 \chi_a &= (1/\sqrt{2}) [|\uparrow_1, \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1, \uparrow_2\rangle]
 \end{aligned} \tag{I.25}$$

Selon l'équation (I.22), la fonction d'espace symétrique doit multiplier la fonction de spin antisymétrique, et vice versa. Par conséquent, les fonctions d'onde antisymétriques totales sont :

$$\begin{aligned}
 \Psi_I &= \varphi_s(1, 2)\chi_a(1, 2), \\
 \Psi_{II} &= \varphi_a(1, 2)\chi_s(1, 2).
 \end{aligned} \tag{I.26}$$

Lorsque les deux électrons sont dans un état triplet de spin, il n'y a aucune chance de les trouver au même point de l'espace. Les électrons à spins parallèles s'évitent mutuellement. Mais si les électrons sont à l'état de spin singlet, avec des spins antiparallèles, il y a une certaine probabilité de les trouver au même endroit, car la partie spatiale de la fonction d'onde est symétrique sous l'échange des électrons.

Les énergies des deux états peuvent être évaluées à partir de l'hamiltonien $\mathcal{H}(r_1, r_2)$ dans l'équation (I.23) :

$$\varepsilon_{I,II} = \int \phi_{s,a}^*(r_1, r_2) \mathcal{H}(r_1, r_2) \phi_{s,a}(r_1, r_2) dr_1^3 dr_2^3. \tag{I.27}$$

Pour la molécule d'hydrogène, ε_I est inférieur à ε_{II} . En d'autres termes, l'état de liaison orbitale/spin singlet se situe en dessous de l'état de liaison orbitale /spin triplet en raison de la contrainte spatiale sur le triplet. En fixant l'intégrale d'échange $J = (\varepsilon_I - \varepsilon_{II})/2$, on peut écrire l'énergie sous la forme :

$$\varepsilon = -2(J/\hbar^2) s_1 \cdot s_2, \tag{I.28}$$

Où le produit $s_1 \cdot s_2$ est $\frac{1}{2} [(s_1 + s_2)^2 - s_1^2 - s_2^2]$. Selon que le nombre quantique de spin $S = s_1 + s_2$ soit 0 ou 1, les valeurs propres sont $-\frac{3}{4}\hbar^2$ ou $+\frac{1}{4}\hbar^2$. La division de l'énergie entre l'état singlet Ψ_I et l'état triplet Ψ_{II} est $2J$. Ici, J est l'intégrale de l'échange :

$$J = \int \psi_1^*(r') \psi_2^*(r) \mathcal{H}(r, r') \psi_1(r) \psi_2(r') dr^3 dr'. \tag{I.29}$$

Dans la molécule H_2 , l'état de spin singlet est plus faible, donc l'intégrale est négative. Par contre, dans un atome, les orbitales sont orthogonales et J est positive.

Heisenberg a généralisé dans (I.27) aux spins atomiques S_1 et S_2 de nombreux électrons, en

I.3 Propriétés magnétiques des nanomatériaux

écrivait son célèbre Hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -2J\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2, \quad (\text{I.30})$$

Où $\hat{S}_1$ et $\hat{S}_2$ sont des opérateurs de spin sans dimension, Le $\hbar^2$ a été absorbé dans la constante d'échange J , qui a des unités d'énergie. Nous allons désormais adopter cette convention, afin d'éviter d'écrire partout. Nous tirons également notre chapeau aux opérateurs de spin $\hat{S}_i$. L'intégrale d'échange J a alors des dimensions d'énergie, et elle est souvent exprimée en kelvin divisé par la constante de Boltzmann k_B . $J > 0$ indique une interaction ferromagnétique, qui tend à aligner les deux spins en parallèles. $J < 0$ indique une interaction antiferromagnétique, qui tend à aligner les deux spins de façon antiparallèle.

Dans un réseau, l'hamiltonien est généralisé à une somme sur l'ensemble paires d'atomes sur les sites du réseau i, j du réseau :

$$\mathcal{H} = -2 \sum_{i>j} J_{ij} S_i \cdot S_j \quad (\text{I.31})$$

On simplifie le tout pour obtenir une somme avec une seule constante d'échange J pour les interactions entre voisins les plus proches. Le couplage d'échange interatomique décrit par l'hamiltonien d'Heisenberg ne peut être que ferromagnétique ou antiferromagnétique.

La constante d'échange J d'Heisenberg peut être reliée à la constante de Weiss n_W selon la théorie du champ moléculaire. Supposons qu'un moment $g\mu_B S_i$ interagisse avec un champ effectif $H^i = n_W M = n_W n g \mu_B S$, et que dans le modèle de Heisenberg, avec g est le facteur de Landé. Seuls les proches voisins de S_i interagissent sensiblement avec lui. Alors l'hamiltonien est :

$$\mathcal{H}_i = -2 \left[\sum_j J S_j \right] \cdot S_i \approx -\mu_0 H^i n g \mu_B S_i. \quad (\text{I.32})$$

L'approximation du champ moléculaire revient à faire la moyenne des corrélations locales entre S_i et S_j . Si Z est le nombre de plus proches voisins, alors $J = \mu_0 n_W n g^2 \mu_B^2 / 2Z$. Ainsi, à partir de l'équation ((I.14)) :

$$T_C = \frac{2ZJS(S+1)}{3k_B} \quad (\text{I.33})$$

La principale distinction à faire entre ces énergies est la distance sur laquelle elles agissent : très localement (courte portée) et concernent donc les sites atomiques les plus proches, ou à longue portée, ils influencent alors tout le système. Dans cette section, nous décrirons d'abord

les différents termes de l'interaction des échanges dans les isolants et dans les métaux [1].

3.2.1 Interactions d'échanges magnétiques dans les isolants

Les interactions d'échange dans les isolants peuvent être décrites par plusieurs modèles : super échange, échange antisymétrique ou échange biquadratique [1].

Interaction superéchange : Les électrons des isolants sont localisés. Les oxydes sont un bon exemple. Il y a peu d'échange direct $3d - 3d$ dans les oxydes des métaux de transition (MnO), mais les orbitales $3d$ sont hybridées avec les orbitales $2p$ de l'oxygène ; $\phi_{3d} = \alpha\psi_{3d} + \beta\psi_{2p}$ avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Les ponts d'oxygène transmettent une interaction de "super-échange" indirecte, qui peut être décrite par le modèle Hamiltonien d'Heisenberg.

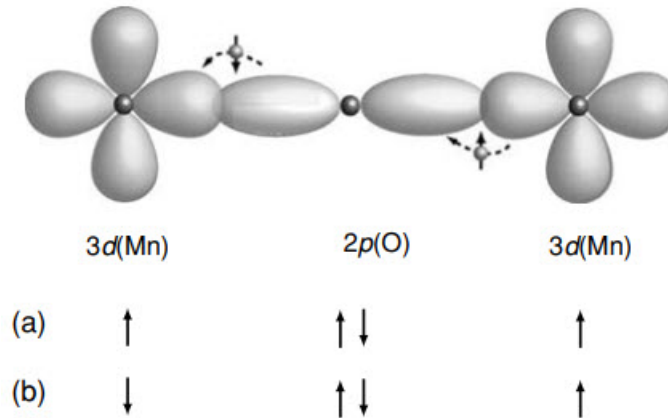


Figure I.14 – Interaction superéchange : L'arrangement antiferromagnétique (b), est moins énergétique que l'arrangement ferromagnétique (a) [1].

^

La figure I.14 montre une liaison de superéchange typique. Dans le cas d'une seule orbitale $3d$ occupée ou d'une couche d à moitié pleine (Fe^{3+} , Mn^{2+}), la configuration (b) est moins énergétique que la configuration (a) car les deux électrons d'une orbitale $2p$ d'oxygène peuvent alors se répandre dans des orbitales $3d$ inoccupées. L'interaction de superéchange J implique le transfert virtuel simultané de deux électrons avec la formation instantanée d'un état excité $3d^{n+1}2p^5$; l'interaction est de l'ordre de $-2t^2/U$, où t est l'intégrale de transfert $p - d$ et U est l'interaction de Coulomb $3d$ sur site. L'intégrale de transfert est d'ordre 0,1eV et l'interaction de Coulomb sur site est comprise entre 3 et 5eV. J dépend sensiblement de la séparation interatomique, mais aussi de l'angle de liaison $M - O - M$, variant comme $\cos^2\theta_{12}$.

L'occupation et la dégénérescence orbitale des états $3d$ est le facteur critique pour déterminer la force et le signe du superéchange. Il y a de nombreux cas possibles à considérer et les résultats ont été résumés dans les règles de Goodenough-Kanamori. Les règles ont été reformulées par Anderson, d'une manière plus simple qui rend inutile la prise en compte de l'oxygène.

- Lorsque deux cations Mn^{2+} ont des orbitales $3d$ occupés qui pointent l'un vers l'autre individuellement en donnant de grandes intégrales de l'échange, l'interaction d'échange est fort et antiferromagnétique ($J < 0$). C'est le cas habituel, pour les liaisons $M-O-M$ $120 - 180^\circ$.
- Lorsque deux cations Mn^{2+} ont des orbitales $3d$ occupés individuellement à une intégrale de l'échange est nulle par symétrie, l'interaction d'échange est ferromagnétique et relativement faible. C'est le cas des liaisons $M-O-M \sim 90^\circ$.
- Lorsque deux cations ont des orbitales $3d$ occupés singulièrement à des orbitales vides ou doublement occupées du même type, l'interaction d'échange est également ferromagnétique, et relativement faible.

L'interaction superéchange est plus souvent antiferromagnétique que ferromagnétique, car les intégrales d'échange sont plus susceptibles d'être grandes que zéro.

Échange antisymétrique : Quelques matériaux à faible symétrie présentent un faible couplage antisymétrique nommé l'interaction Dzyaloshinski-Moriya. Celle-ci est représentée par l'interaction Hamiltonienne :

$$\mathcal{H} = -D \cdot (S_i \times S_j) \quad (\text{I.34})$$

Où D est le vecteur Dzyaloshinski qui se trouve le long d'un axe de haute symétrie, qui couplait les deux spins perpendiculairement S_1 et S_2 voisins non équivalents comme le montre la figure I.15. Il s'agit d'un effet d'ordre supérieur, se produisant entre des ions déjà couplés par un superéchange ; $|D/J| \approx 10^{-2}$. Dans un antiferromagne, les spins peuvent être inclinés par rapport à l'axe antiferromagnétique d'environ 1° . L'échange antisymétrique est la raison pour laquelle les antiferroaimants ayant une structure cristalline uniaxiale comme le MnF_2 , le $MnCO_3$ et αFe_2O_3 peuvent présenter un faible moment ferromagnétique. Dans la littérature ancienne, le terme de ferromagnétisme parasite est utilisé pour ce type de ferromagnétisme intrinsèque faible, car on pensait qu'il était dû à des impuretés ferromagnétiques. Un moment n'apparaît que lorsque l'axe antiferromagnétique est perpendiculaire à l'axe cristallographique de symétrie, le long duquel D est contraint de se trouver. Il disparaît lorsque les axes sont parallèles [1, 78].

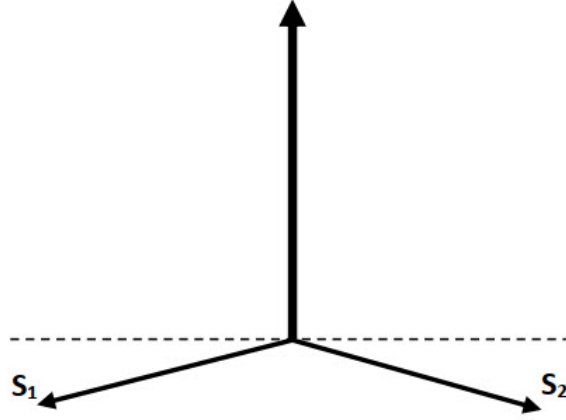


Figure I.15 – Interaction Dzyaloshinski-Moriya [1].

Échange biquadratique : C'est un autre effet faible, d'ordre supérieur, qui est parfois détectable pour les terres rares. Il est représenté par l'effet Hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -\beta \cdot (S_i \times S_j)^2 \quad (\text{I.35})$$

3.2.2 Interactions d'échanges magnétiques dans les métaux

Le mécanisme principal d'échange dans les métaux ferromagnétiques et antiferromagnétiques implique de l'interaction des orbitales atomiques partiellement localisées des atomes adjacents. D'autres mécanismes d'échange impliquent l'interaction d'électrons purement délocalisés ou d'électrons localisés et délocalisés dans le métal.

Les interactions d'échange dans les métaux peuvent être décrites par plusieurs modèles : échange directe, modèle sd, interaction RKKY, et double échange [1].

Échange directe : Cela provient de la répulsion de Coulomb entre deux électrons situés sur des atomes voisins (ou sur le même atome), et qui devient dépendant de l'état de spin (vers le haut ou vers le bas) en raison du principe d'exclusion de Pauli. C'est une interaction à très courte distance qui est responsable de l'alignement des moments magnétiques et qui peut être utilisée, par exemple, pour obtenir une phase ferromagnétique [1].

L'ordre de grandeur, le signe et la portée de l'interaction dépendent des atomes et de la structure cristallographique. Le plus souvent, de manière phénoménologique, cette interaction peut toujours être écrite sous la forme :

I.3 Propriétés magnétiques des nanomatériaux

$$\varepsilon_{ex} = -\frac{1}{2}\mu_0 \sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} \alpha_{ij} \vec{m}_i \vec{m}_j \quad (\text{I.36})$$

Où α_{ij} sont les coefficients d'interaction entre les moments magnétiques.

Dans le cas des métaux de transition $3d$, on observe un cas particulier où le moment cinétique orbital μ_l est minimisé en raison du champ cristallin du solide. C'est ce qu'on appelle l'extinction du moment orbital. L'interaction du type spin-orbite est alors très faible, voire inexistante. Le moment magnétique résultant correspond donc au seul moment du spin. L'énergie d'échange est alors écrite :

$$\varepsilon_{exspin} = -\sum_{\substack{ij \\ i \neq j}} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (\text{I.37})$$

Où J_{ij} est la constante d'échange entre deux atomes voisins. Cette valeur est également appelée intégrale d'échange car elle est proportionnelle au chevauchement orbital, et disparaît si le chevauchement est inexistant. Elle dépend donc de la distance entre les atomes et du type d'orbitales qui contribuent au magnétisme. Lorsque $J > 0$, un alignement parallèle des moments de spin est favorisé, conduisant à une configuration ferromagnétique, $J < 0$ donne une configuration antiferromagnétique (lorsque les autres termes énergétiques sont négligés).

L'échange d'énergie d'un solide magnétique qui a un volume V est exprimé sous forme continue :

$$E_{exvol} = A_{ex} V M_s ((\vec{\nabla} m_x)^2 + (\vec{\nabla} m_y)^2 + (\vec{\nabla} m_z)^2) \quad (\text{I.38})$$

Avec $m_{x,y,z}$ la composante réduite du moment magnétique dans les trois directions de l'espace est A_{ex} la constante d'échange du matériau considéré par J/m ($A_{ex} \approx \frac{NJS^2}{2a}$), avec N le nombre de voisins les plus proches, et S le nombre quantique total de spin). Elle est en fonction de l'intégrale d'échange J , mais aussi de la distance entre les moments, de la structure cristallographique du solide, et du nombre de voisins les plus proches.

Ce type d'échange est décrit comme un échange isotrope (ou direct). Pour les cas où le chevauchement direct n'est plus possible en raison de la distance des spins (alors plus proche du noyau atomique), une interaction d'échange indirect peut maintenir un certain ordre magnétique. En résumant brièvement la théorie de ce type d'échange : Ces deux types d'interactions d'échange (directes et indirects) sont appelés interactions symétriques car l'énergie est définie comme le produit scalaire de deux spins voisins.

Nous verrons plus loin qu'il est également possible de définir un échange de type anti symé-

trique, dont l'énergie (discrète) dépendra du produit vectoriel de deux spins. L'échange dans une bande à peu près à moitié remplie est antiferromagnétique, car le gain d'énergie associé au fait de laisser les fonctions d'onde se propager sur les sites voisins n'est obtenu que lorsque les voisins sont antiparallèles, ce qui laisse des orbitales $\uparrow$ vides sur les sites voisins pour le transfert comme le montre la figure I.16. Les bandes presque pleines ou presque vides ont tendance à être ferromagnétiques comme le montre la figure car les électrons peuvent alors sauter dans des états vides avec le même spin. Cela permet d'expliquer pourquoi le chrome et le manganèse sont antiferromagnétiques, alors que le fer, le cobalt et le nickel sont ferromagnétiques.

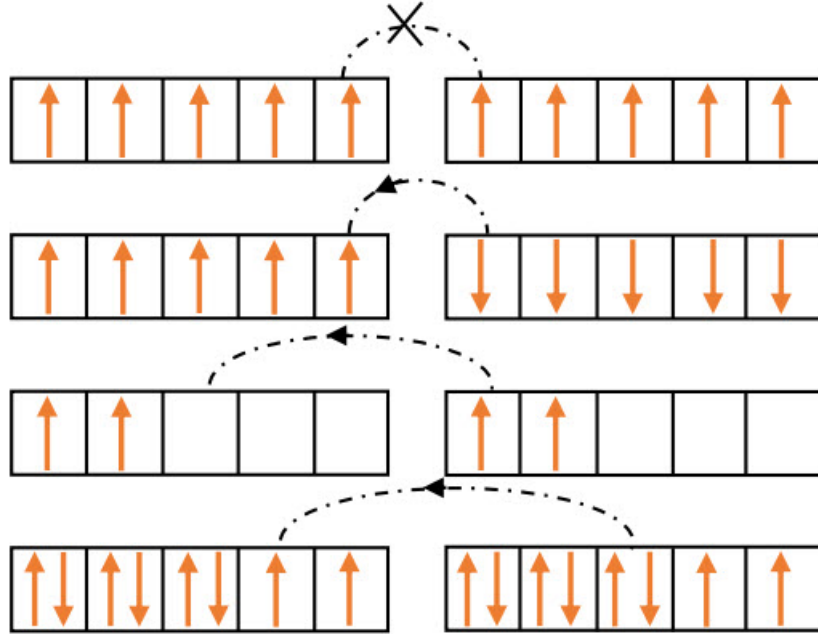


Figure I.16 – Délocalisation des électrons dans les bandes d qui sont à moitié pleines, presque vides ou presque pleines [1].

Modèle sd : Le couplage des spins s des électrons de conduction avec les spins du noyau S dans un métal est généralement représenté par un hamiltonien comprenant le terme :

$$- J_{sd} \Omega |\Psi|^2 S \cdot s \quad (\text{I.39})$$

Où Ω est le volume du noyau-enveloppe d d'une impureté de transition et $|\Psi|^2$ est la densité de probabilité électronique s . Le couplage $s-d$ est une interaction sur site, donc la constante de couplage est grande, $J_{sd} \approx 1 \text{ eV}$. Cette interaction peut conduire à un couplage ferromagnétique

à longue distance entre les spins du noyau, que J_{sd} soit positif ou négatif. La bande de conduction hôte est supposée être uniformément polarisée en parallèle ou antiparallèle aux spins du noyau.

Interaction RKKY : Le modèle $s - d$ s'applique également aux terres rares, où le spin du noyau n'est pas $3d$, mais $4f$. Les moments localisés dans l'enveloppe $4f$ interagissent par l'intermédiaire d'électrons dans la bande de conduction $5d/6s$. L'interaction localisée entre un spin du noyau S et un spin d'électron de conduction s est $-J_{sf} S \cdot s$, où $J_{sf} \approx 0,2eV$. Ruderman, Kittel, Kasuya et Yosida ont montré qu'une seule impureté magnétique crée en fait une polarisation non uniforme et oscillante du spin dans la bande de conduction, qui tombe sous la forme r^{-3} . Cette polarisation de spin est liée aux oscillations de Friedel de la densité de charge autour de l'impureté qui ont la longueur d'onde π/k_F . Elle conduit à un couplage oscillatoire à longue portée entre les spins du noyau [1].

Pour les électrons libres, la polarisation est proportionnelle à la fonction RKKY présenté dans la figure I.17 :

$$F(\xi) = \frac{(\sin\xi - \xi\cos\xi)}{\xi^4} \quad (\text{I.40})$$

Où $\xi = 2k_F r$, k_F étant le vecteur d'onde de Fermi comme le montre la Figure I.17. Cette polarisation de spin oscillante résulte des différents potentiels vus par les électrons de conduction $\uparrow$ et $\downarrow$ au site du moment local. Le premier zéro de $F(\xi)$ se trouve à $\xi = 4,5$. Le couplage effectif entre deux spins localisés est de :

$$J_{eff} \approx \frac{9\pi J_{sf}^2 \nu^2 F(\xi)}{64\xi_F} \quad (\text{I.41})$$

Où ν est le nombre d'électrons de conduction par atome et ξ_F est l'énergie de Fermi. Comme le vecteur d'onde de Fermi est d'environ $0,1 \text{ nm}^{-1}$, le signe de J_{eff} fluctue sur une échelle de nanomètres. Lorsque le couplage ferromagnétique du plus proche voisin seul est important, la température de Curie peut être déduite. L'interaction RKKY dans la limite de la faible densité d'électrons est équivalent au modèle $s - d$ avec couplage ferromagnétique. L'échange oscillatoire analogue se retrouve dans les multicouches ferromagnétiques avec espaceur non magnétique couches.

Parmi les métaux des terres rares, seul le gadolinium a un bon nombre quantique de S . Les autres ont J comme nombre quantique, mais les couples d'interaction d'échange tournent. Nous devons donc projeter S sur J lors du calcul du couple d'échange, qu'il soit direct ou indirect. Puisque $L + 2S = gJ$, $J = L + S$ et $S = (g - 1)J$. Ceci introduit un facteur $(g - 1)^2 J(J + 1)$ dans le couplage d'échange. Le facteur est au carré, car le spin entre dans l'échange l'interaction

entre deux terres rares à deux reprises. Le couplage effectif est :

$$J_{RKKY} = GJ_{eff} \quad (\text{I.42})$$

où $G = (g - 1)^2 J(J + 1)$ est le facteur de Gennes. Les températures d'ordre magnétique pour toute série de métaux ou de composés de terres rares ayant la même structure de bande de conduction et des espacements de réseau similaires doivent s'échelonner avec G , et présenter un maximum pour le gadolinium.

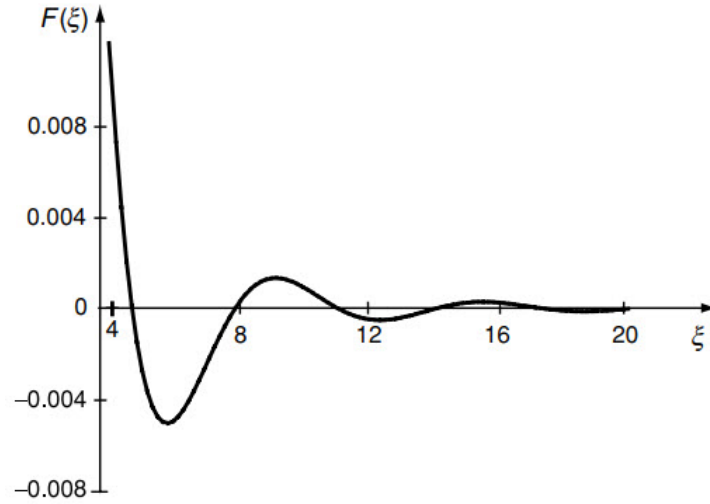


Figure I.17 – Fonction $F(\xi)$ de RKKY. Notez que $F(\xi)$ devient très grande lorsque $\xi < 4$ [1].

Interaction double échange : Cette interaction se produit entre des ions $3d$ qui ont à la fois des électrons d localisés et délocalisés. Contrairement au super-échange ferromagnétique, les configurations à valence mixte sont nécessaires pour le double échange, comme dans tout métal, mais contrairement à un métal normal, le nombre de configurations est limité à deux seulement. Dans le cuivre, par exemple, avec son seul électron dans une large bande $4s$, les configurations atomiques instantanées sont s^0, s^1 et s^2 . Les corrélations électroniques sont faibles dans les larges bandes, de sorte que les trois configurations apparaissent avec des probabilités de $1/2$, $1/4$ et $1/4$. Par contre, un matériau à double échange, tel que le manganite $(La_{0.7}Ca_{0.3})MnO_3$, a des ions Mn^{4+} et Mn^{3+} (d^3 et d^4) présente sur des sites octaédriques. Les deux états de valence du Mn sont imposés par les états de charge des autres ions du composé, La^{3+} , Ca^{2+} et O^{2-} [1].

3.3 Anisotropies magnétiques des nanomatériaux

L'expression "anisotropie magnétique" est ambiguë. Comme un champ magnétique est une quantité vectorielle, il implique par définition une dépendance à la direction. En 1821, Poisson a supposé une interaction entre le magnétisme et la cristallinité. Après 1850, le "magnétisme des cristaux" a été étudié expérimentalement. Depuis lors, on sait que le diamagnétisme, le paramagnétisme et le ferromagnétisme naturel dépendent tous des propriétés des différents matériaux, en particulier des propriétés cristallographiques.

Toute dépendance des propriétés magnétiques d'un matériau par rapport à la direction peut être appelée anisotropie magnétique. Elle peut être décrite par une "fonction d'anisotropie" sans dimension, et elle est étroitement liée aux modèles de l'aimantation dépendant de l'espace, ce qui donne une énergie libre magnétique totale (dépendant de la direction). Cependant, d'habitude seules les propriétés magnétiques des solides à l'état magnétique ordonné sont caractérisées par l'anisotropie magnétique.

On peut distinguer plusieurs origines et manifestations différentes de l'anisotropie magnétique, à savoir l'anisotropie de forme, l'anisotropie d'échange, l'anisotropie de contrainte, l'anisotropie de surface, l'anisotropie induite par un champ magnétique et enfin l'anisotropie magnétocristalline. Cette dernière est la plus importante pour les matériaux magnétiques durs et les aimants permanents modernes [1, 79].

3.3.1 Définition

La définition du dictionnaire de l'anisotropie est la suivante : " une différence de propriété ou d'effet dans différentes directions ". L'anisotropie magnétique dans les matériaux concerne l'observation que l'aimantation préfère être parallèle ou antiparallèle à une direction ou à un axe particulier. Un traitement détaillé des principes fondamentaux de l'anisotropie magnétique est donné par Chikazumi (1997) [80]. Jusqu'à une approximation suffisante, l'anisotropie effective, K_{EFF} , peut être écrite de manière phénoménologique en termes d'un terme de volume, K_V , et d'un terme de surface, K_S :

$$K_{EFF} = K_V + 2K_S/t_F \quad (\text{I.43})$$

Où t_F est l'épaisseur de l'élément magnétique. K_V contient nécessairement un terme d'anisotropie magnétocristalline, tout terme de contrainte, tout terme d'anisotropie de forme, tout terme d'anisotropie induite par la croissance, et toute autre source volumique d'anisotropie. L'énergie de démagnétisation pour un film magnétisé normalement à sa surface est également

incluse comme dernier terme :

$$K_V = (K_{MC} + K_{ST} + K_{SH} + \dots - \mu_0 M_S^2/2) \quad (\text{I.44})$$

Dans le cas d'un film mince, le terme de surface, qui tient compte des deux surfaces, n'est significatif que si t_F a des dimensions nanométriques. Ceci peut se produire pratiquement dans les systèmes multicouches. K_{EFF} est positif pour une aimantation perpendiculaire.

3.3.2 Anisotropie magnéto-cristalline

L'origine microscopique de cette anisotropie est liée à l'état de spin des moments magnétiques et à la symétrie de leur disposition dans le réseau cristallin qui implique un couplage spin-réseau. Elle peut être décrite de la manière suivante (Kirchmayr 1991) [81–83]. Elle se produit dans tous les matériaux ferro- et ferrimagnétiques cristallins. L'anisotropie peut être décrite phénoménologiquement en termes de cosinus de la direction de l'aimantation par rapport aux axes de coordonnées rectangulaires ou en termes d'harmoniques sphériques. Toute aimantation perpendiculaire se produira de manière réaliste dans un système effectivement uniaxial. Cette dernière représentation donne, pour une symétrie hexagonale simple:

$$E_{MC} = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + \dots + K_4 \sin^6 \theta \cos 6\varphi \quad (\text{I.45})$$

et pour les cristaux tétraonaux:

$$E_{MC} = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_3 \sin^4 \theta \cos 4\varphi \quad (\text{I.46})$$

Où K_i est les coefficients d'anisotropie exprimés en $J.m^{-3}$ ou GOe ; $1GOe = 7.9577 kJ.m^{-3}$, les constantes d'anisotropie ne reflètent l'anisotropie magnétique que de manière phénoménologique et n'ont aucun lien direct avec l'origine physique de l'anisotropie magnétique. θ et φ des angles polaire et azimutaux entre l'aimantation et les axes c et a . Dans un film orienté avec un axe facile normal ou proche de la normale à la surface du film, une aimantation perpendiculaire peut être obtenue, en l'absence de toute autre source d'anisotropie, si l'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline est plus grande que l'énergie de démagnétisation. Ceci nécessite, suivant l'équation (I.44), à une approximation suffisante de négliger les termes supérieurs $K_1 > \mu_0 M_S^2/2$.

3.3.3 Anisotropie des contraintes ou magnéto-élastique

Cette anisotropie provient des contraintes produites dans le film par le processus de dépôt ou par les différences d'expansion thermique entre le substrat et le film magnétique [84, 85].

I.3 Propriétés magnétiques des nanomatériaux

L'énergie magnétoélastique produite par une contrainte σ est essentiellement le produit de cette contrainte et de la valeur résultante de la déformation magnétique ou magnétostriction λ . Encore une fois, en supposant un système uniaxial, l'énergie magnétoélastique volumique est donnée par :

$$E_{ML} = -3\sigma\lambda_s \cos^2\theta/2 \quad (\text{I.47})$$

Où λ_s est un coefficient de magnétostriction isotrope et θ est l'angle entre l'aimantation M_S et σ . La contrainte peut donc créer une anisotropie uniaxiale avec une constante d'anisotropie extérieure induite par la contrainte, donnée par :

$$K_{ST} = 3\sigma\lambda_s/2 \quad (\text{I.48})$$

L'axe de contrainte est une direction de l'aimantation facile si $0 < \sigma\lambda_s$, c'est-à-dire, une magnétostriction positive favorisera une aimantation perpendiculaire pour une contrainte de compression dans le film.

3.3.4 Anisotropie de forme

En général, l'énergie magnétostatique dans un film mince agit pour orienter l'aimantation dans le plan du film comme suggéré ci-dessus [86]. Cependant, de nombreux films déposés peuvent contenir des unités microstructurelles qui, par leur forme et leur orientation, favorisent une aimantation normale au film. Ceci est très possible dans les films qui contiennent des grains colonnaires ou des vides directionnels. Dans un sphéroïde prolongé, l'énergie magnétostatique peut s'écrire comme suit :

$$E_{ME} = \mu_0(N_a - N_c)M_s^2 \sin^2\theta/2 \quad (\text{I.49})$$

Où N_a et N_c sont des facteurs constants appelés facteurs de démagnétisation liés aux axes semi-mineur et semimajeur, respectivement, et θ est l'angle entre M_S et l'axe c . Par analogie avec le cas de contrainte, une constante d'anisotropie de forme peut s'écrire comme suit :

$$K_S = \mu_0(N_a - N_c)M_s^2/2 \quad (\text{I.50})$$

Si $N_a < N_c$ alors l'anisotropie de forme est minimum avec M_S suivant l'axe c .

3.3.5 Anisotropie de surface ou d'interface

L'anisotropie d'interface ou de surface est liée à la symétrie réduite, aux nombres de coordination plus faibles, à la présence d'états localisés près de la surface et de l'interface, et d'autres effets à la surface (Bayreuther 1989) [87]. La symétrie réduite à la surface modifie l'anisotropie magnétocristalline et cette contribution peut, en fait, être positive ou négative encourageant l'aimantation hors plan et dans le plan. Il peut également y avoir une contribution à l'anisotropie de l'interface qui est d'origine magnétoélastique. Ce phénomène est lié à la réduction des contraintes par la formation de défauts aux interfaces. Il est inversement proportionnel à l'épaisseur de la couche et peut donc être significative faibles épaisseurs. D'un point de vue phénoménologique, l'effet de l'anisotropie de surface peut être représenté par un terme K_S ajouté à l'anisotropie de volume dans une équation pour l'anisotropie totale, comme le montre l'équation (I.43). Conventionnellement, un K_{EFF} positif signifie une anisotropie perpendiculaire et le graphe de $K_{EFF}t_F$ en fonction de t_F donne une pente de K_V et un intercept de $2K_S$.

Il existe une autre anisotropie qui ne sera mentionnée que brièvement car elle n'est pas importante ici : l'anisotropie d'échange. Cet effet est unidirectionnel et implique le pincement des moments dans une couche de ferromagnétique par une couche d'antiferromagnétique adjacente lors du refroidissement par la température de Néel de l'antiferromagnétique dans un champ appliqué. L'anisotropie d'échange revêt une importance croissante dans plusieurs dispositifs magnétiques en couches minces, tels que les capteurs à magnétorésistance géante.

4 Transitions de phase et Classification de Néel

Introduction

Le phénomène des transitions de phase occupe une place majeure en physique de la matière Condensée et la physique statistique, pour nombreuses raisons : ces comportements magnétiques ou thermodynamiques, sa fréquence et sa diversité, ces quantités spectaculaires utilisés pour résoudre des problèmes conceptuels qui s'y rattachent. [88].

C'est un fait d'expérience quotidienne que la matière en équilibre thermodynamique existe dans différentes phases macroscopiques. En effet, il est difficile d'imaginer la vie sur Terre sans les trois phases de l'eau. Un échantillon typique de matière, par exemple, a le diagramme de phase température-pression présenté à la figure I.18 : en changeant l'un ou l'autre des deux paramètres, le système peut être amené dans une phase solide, liquide ou gazeuse. Le change-

ment de phase peut être progressif ou brutal. Dans ce dernier cas, la transition de phase a lieu à des valeurs bien définies des paramètres qui déterminent la limite de phase. En fait, il existe des milliers de phases. Par exemple, le ferromagnétique est une phase, comme un aimant permanent en fer. Lorsque vous chauffez un tel aimant à une température suffisamment élevée, il subit une transition de phase et cesse d'être magnétique. Les conducteurs, les isolants et les semi-conducteurs sont également des phases de la matière. à des températures très élevées, les noyaux se séparent en une phase quark-gluon. Les solides présentent généralement de nombreuses phases, déterminées par la structure cristalline ou les propriétés topologiques. Par exemple, le diamant et le graphite sont deux phases du carbone avec une structure de réseau différente.

Les transitions de phase sont définies comme des points dans l'espace des paramètres où le potentiel thermodynamique devient non-analytique. Une telle non-analyticité ne peut apparaître que dans la limite thermodynamique, lorsque la taille du système est supposée être infinie. Dans un système fini, la fonction de partition de tout système est une somme finie de fonctions analytiques de ses paramètres, et est donc toujours analytique. Une transition de phase nette est donc une idéalisation mathématique, bien qu'elle décrive extrêmement bien la réalité. Les systèmes macroscopiques contiennent généralement $\sim 10^{23}$ degrés de liberté, et sont donc très proches de la limite thermodynamique. Les limites de phase de la figure I.18, par exemple, représentent pour cette raison des quantités physiques reproductibles.

Il est en fait assez difficile de trouver une dénomination précise d'une phase. Certains manuels disent.

- Une phase est un état uniforme de la matière : Il s'agit d'une dénomination intuitive, mais pas très précise. Prise au pied de la lettre, elle est trop générale : un gaz à une température différente est un état uniforme différent de la matière. S'agit-il donc d'une phase différente. Nous ne voulons pas qu'il le soit. Nous voulons que le gaz soit la phase. Une définition plus précise techniquement est :
- Une phase est un état de la matière dont les propriétés varient de manière régulière (c'est-à-dire qu'elle est une fonction analytique de P ; V ; T etc).

L'exemple le plus connu, l'eau est composé par des diverses phases : solide (comme glace), liquide, gaz (vapeur), dans différentes l'expériences quotidiennes, qu'on peut observé à partir des changements de la température et des transitions de phase d'un état vers l'autre, comme :

- Fusion : Transition solide-liquide.
- Congélation/Fusion : Transition liquide-solide.
- Ébullition/vaporisation : Transition liquide-gaz.
- Condensation : Transition gaz-liquide

Chapitre I. Généralités sur le magnétisme, les nanomatériaux, les propriétés magnétiques et hystérétiques

- Sublimation : Transition solide-gaz.
- Dépôt : passage gaz-solide.

Ces transitions sont caractérisées par, des changements d'états qualitatifs et quantitatifs la discontinuité des grandeurs physiques, une petite variation d'une quantité physique comme (température T , pression P , aimantation M) provoque une modification qualitative. La physique de la matière condensée et la physique statistique ont très riches d'exemples de telles transitions de phase : Par exemple les changements magnétiques, paraélectrique et ferroélectriques [89], supra-fluides [90], supra-conducteurs [91], démixtion de mélange [92], ordre-désordre dans les alliages [93], les changements structuraux solide-liquide ou entre différentes phases cristallines ou encore entre mésophases des cristaux liquides [94], etc...

Ce qui frappe tout d'abord, c'est la très grande diversité de ce domaine des transitions de phase : variété des systèmes, des interactions d'échange mises en jeu, des paramètres physiques convenables pour provoquer les transitions de phase et des quantités thermodynamiques affectées, des ordres de grandeur, etc. Il faut, évidemment, souligner qu'en dépit de cette richesse, ce champ d'études présente également une très grande unité : unité des concepts mis en jeu, des méthodes d'étude utilisées et surtout d'un grand nombre de comportements, notamment des comportements critiques. Dans ce domaine physique d'une si grande diversité et d'une si grande complexité, il n'est tout à fait remarquable que certains résultats physiques aient une portée absolument générale. Comprendre ce comportement physique et critique représente un défi particulièrement intéressant et important à relever.

Pour un système donné, on fait varier un certain nombre de paramètres d'ordre (température T , pression P , champs extérieurs H , aimantation M etc...) pour mettre en évidence les diverses phases du système et en explorer les domaines d'existence, et on consigne les résultats sur une carte : on détermine un diagramme de phase.

Pour comprendre et définir quelques concepts, on considère des trois diagrammes de phases particuliers suivants :

- Diagramme dans le plan (pression (P), température (T)) illustrant l'existence de trois phases (solide, liquide, gaz). On mentionne qu'il y'a deux points particuliers critique : le point triple T_t , à la jonction des trois domaines : le point critique (P_c, T_c), point d'arrêt à la frontière entre les phases liquide et gaz présenté par la figure I.18. En tournant autour du point critique, on peut passer de la phase liquide à la phase gazeuse de manière continu par exemple [95]. On observe aussi que, la pente de la ligne de transition liquide-solide est négative car le volume molaire du solide est supérieur à celui du liquide, contrairement au cas usuel.
- Diagramme dans le plan (champ magnétique (H), température (T)) pour les corps qui

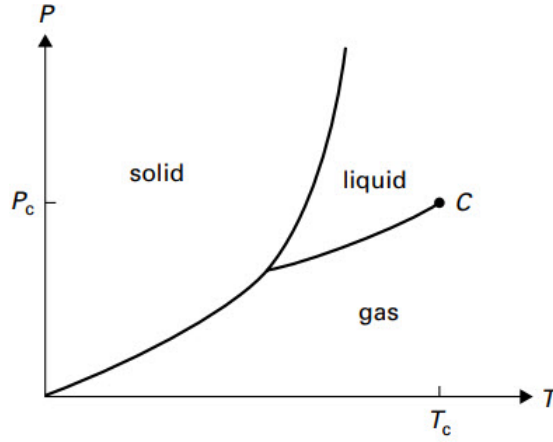


Figure I.18 – Diagramme de phase pression-température (P, T). Toutes les transitions de phase sont discontinues, sauf au point critique (C).

caractérisait par une transition ferromagnétique donnée dans la figure I.19: Ce diagramme illustre une frontière sur l'axe $H = 0$ avec un point d'arrêt, qu'on n'appelle aussi la température critique T_c . Pour un champ nul, quand T est augmenté, on peut observer à haute température, une phase désordonnée dite cas paramagnétique sans aimantation M . Lorsque $T = T_c$, au point critique, c'est la température de transition, et pour $T < T_c$, on peut remarquer qu'il y a une phase ordonnée de spins, dite cas ferromagnétique, caractérisé par une aimantation spontanée. Il existe une analogie avec le changement liquide-gaz, H et P jouant des rôles similaires. Dans le 2ème diagramme, si on traverse la frontière ($H = 0, 0 < T < T_c$), on peut montrer un saut de l'aimantation. Ce saut diminue quand le point de franchissement de la frontière se rapproche du point critique. Il n'y a plus de saut de l'aimantation par exemple au point critique T_c . [96].

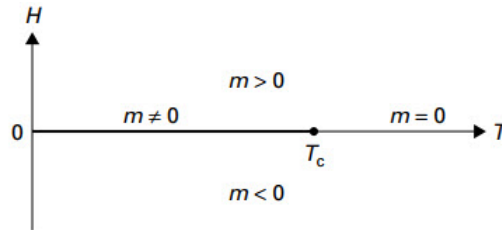


Figure I.19 – Diagramme de phase d'une substance ferromagnétique dans le plan (H, T). Il existe une ligne de discontinuité, sur l'axe $H = 0$, pour une température inférieure à la température critique T_c .

— Diagramme dans le plan (aimantation (M), température (T)) mais pour un corps qui

présente une transition antiferromagnétique (avec une aimantation partielle dans la phase ordonnée de spins) comme le montre la figure I.20: On peut noter qu'il y a sur ce diagramme deux régions séparées par une ligne (une partie en trait épais, l'autre en trait fin) : quand on franchit la partie épaisse, on observe un saut de l'aimantation partielle ; quand on franchit la ligne fine, il n'y a pas de saut. Cette dernière ligne est une ligne de points critiques (puisque'il n'y a pas de saut). La ligne de points critiques à un point d'arrêt, sur la ligne de transition, qu'on appelle la température tricritique [97].

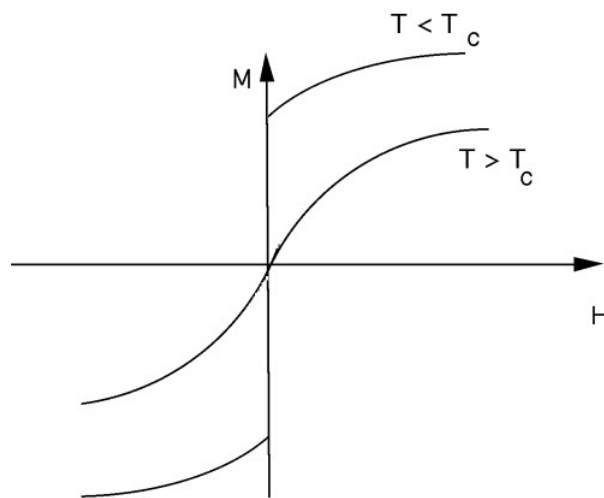


Figure I.20 – Courbes d'aimantation ($M(H)$) pour une substance ferromagnétique en fonction de la températures. L'aimantation présente une discontinuité quand le champ magnétique H change de signe pour $T < T_c$. Cette discontinuité n'existe plus dans le cas $T > T_c$.

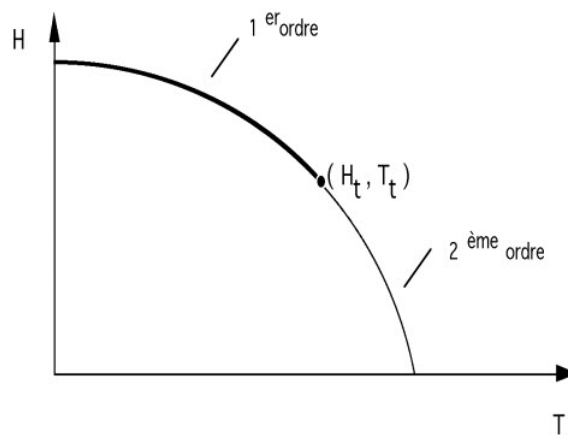


Figure I.21 – Exemple de diagramme de phase montrant une température tri-critique.

4.1 Classification des transitions de phase

Comme nous l'avons déjà cité, le domaine des transitions de phase connaît, tout à la fois, une diversité foisonnante extrêmement riche et intéressante, mais aussi de nombreuses propriétés critique et magnétiques communes. C'est pourquoi est apparue, très tôt, la nécessité d'apporter une certaine classification dans cette diversité. Tout naturellement, les transitions de phase étant caractérisées par leurs singularités thermodynamiques, c'est par la nature de ces singularités qu'on a, tout d'abord, tenté d'effectuer cette classification. Mais, avec l'évolution historique de la thermodynamique et de la physique statistique, diverses façons de discuter ces singularités ont été, en leur temps, proposées. Ces différentes classifications traduisent l'évolution conceptuelle des méthodes d'études des transitions de phase. La classification la plus ancienne, de nature thermodynamique, est due à Ehrenfest. Elle repose sur l'analyse des singularités du potentiel thermodynamique. Puis est apparue, avec L.D. Landau, la notion très importante de brisure spontanée de symétrie, qui correspond à une classification différente. Enfin, les méthodes du groupe de renormalisation appliquées aux phénomènes critiques des transitions de phase, a permis de distinguer les transitions où la longueur de corrélation diverge de celles où celle-ci reste finie. Il faut souligner que ces différentes classifications ne se recouvrent pas exactement (voir la figure I.21). Mais toutes, évidemment, présentent leur intérêt propre.

4.1.1 Classification d'Ehrenfest

Paul Ehrenfest a donné une classification précoce des transitions de phase selon le degré de la dérivée du potentiel thermodynamique par rapport au paramètre d'accord qui présente une discontinuité. Nous nous en tiendrons à la classification moderne, plus simple, dans laquelle les transitions de phase peuvent être soit continues (second ordre), soit discontinues (premier ordre) comme le montre la figure I.22. Une transition de phase continue est un changement de phase d'un système macroscopique en équilibre non accompagné de chaleur latente. Les transitions de phase qui impliquent de la chaleur latente, comme la congélation de l'eau par exemple, seront dites de premier ordre, ou discontinues. Les propriétés non analytiques des systèmes proches d'une transition de phase continue sont appelées phénomènes critiques. Le point du diagramme de phase où se produit une transition de phase continue est appelé point critique [98].

Considérant le potentiel thermodynamique $G = U - TS + pV$, P. Ehrenfest en 1933 introduit la première classification des types généraux de transition entre phases de la matière. il proposa d'appeler transition du premier ordre les transitions s'accompagnant de discontinuités

dans les grandeurs physiques, comme l'entropie, qui sont reliées à des dérivées premières du potentiel thermodynamique, et transitions du second ordre les transitions s'accompagnant de discontinuités dans les grandeurs physiques, comme la chaleur spécifique, qui sont reliées à des dérivées secondes du potentiel thermodynamique, les dérivées premières restant continues [99].

Transition du premier ordre :

- Il s'agit de toute transition qui implique une chaleur latente, c'est-à-dire que le système absorbe de la chaleur mais que la température reste constante.
- Le système ne passe pas entièrement à la nouvelle phase en une seule fois et de façon régulière (des régions des deux phases existent simultanément).
- Il y a une discontinuité dans les variables d'état du système (comme la température ou la pression).
- Les exemples incluent la fonte de la glace et l'ébullition de l'eau (toute la glace ne fond pas instantanément et toute l'eau ne se transforme pas immédiatement en vapeur).

Transitions du second ordre :

- Ces transitions se produisent de manière continue.
- L'ensemble du système passe à la nouvelle phase de façon continue.
- Cet ordre de transitions englobe celles où les quantités thermodynamiques divergent (comme la susceptibilité magnétique, la capacité thermique, etc.).
- Les exemples incluent la transition ferromagnétique à la température de Curie, la supraconductivité et les superfluides. Le point critique illustré à la figure 17 est également une transition de second ordre.

4.1.2 Classification de Landau

Cette classification constitue la base conceptuelle de toute la théorie de Landau des transitions de phase. Landau notera que le passage d'une phase à l'autre, lors d'une transition sans chaleur latente, s'accompagnait d'un changement de symétrie. La phase à basse température, c'est-à-dire, sauf exception, c'est la phase de plus basse entropie, le cas de la phase ordonnée de spins, est en général moins symétrique que celle à haute température. On peut dire que le système a perdu un ou plusieurs paramètres de symétrie lors de la transition. La phase ordonnée, étant moins symétrique que la phase à haute température, ne peut plus être décrite par les mêmes variables. Il faut prendre une variable supplémentaire pour décrire complètement la phase la moins symétrique. Cette variable supplémentaire devra à la fois, décrire la perte de symétrie du système, mais aussi, en même temps, le degré d'ordre acquis par le système,

puisque c'est l'apparition de l'ordre qui abaisse la symétrie. De façon évidente, cette variable doit être nulle, par raison de symétrie, dans la phase symétrique, c'est-à-dire la phase à haute température, et non nulle dans la phase ordonnée. De plus, on doit choisir une variable extensive. Cette variable, associée au changement de symétrie induit par la transition du système, a été dénommée par Landau le paramètre d'ordre de la phase ordonnée [100, 101].

La notion de paramètre d'ordre permet de classer les transitions de phase de la manière suivante : On distingue deux types de transitions présentés par la figure I.22:

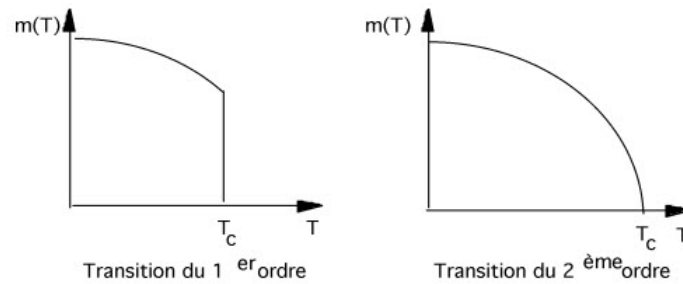


Figure I.22 – Variations d'aimantations en fonction de la température, le cas d'une transition de phase du premier ordre et du second ordre, selon la théorie de Landau

Les transitions de phase sans paramètre d'ordre : Les groupes de symétrie des deux phases sont tels qu'aucun n'est strictement inclus dans l'autre. Il est alors, impossible de trouver un paramètre d'ordre. Ces transitions de phase sont toujours du premier ordre selon la théorie d'Ehrenfest, c'est-à-dire qu'il existe une chaleur latente, mais il est impossible de définir un ordre de la transition de phase selon la classification de Landau.

Les transitions de phase avec paramètre d'ordre : Le groupe de symétrie de la phase la moins symétrique (phase ordonnée) est strictement inclus dans celui de la phase de haute température: c'est un sous-groupe du groupe de symétrie de la phase la plus symétrique (phase désordonnée). Si le paramètre d'ordre est discontinu au point de transition ou critique, on dit que la transition de phase est du premier ordre ; si au contraire le paramètre d'ordre est continu, on dit que la transition de phase est du second ordre.

4.2 Températures de transition

La température de transition est la température à laquelle se produit un changement soudain des propriétés physiques, comme un changement de phase ou de structure cristalline, ou à

laquelle une substance devient supraconductrice.

4.2.1 Température de Curie

La température de Curie T_c est la température à laquelle ou au-dessus de laquelle certains matériaux perdent leurs propriétés magnétiques permanentes. Il s'agit d'un changement brutal des propriétés magnétiques des matériaux. Le magnétisme induit peut souvent remplacer ce magnétisme perdu. Le magnétisme permanent est dû à l'alignement des moments magnétiques du matériau, tandis que le magnétisme induit apparaît lorsque nous forçons des moments magnétiques désordonnés à s'aligner en présence d'un champ magnétique. À la température de Curie ou au-dessus, les moments magnétiques ordonnés passent à un état désordonné, ce qui fait passer les matériaux de l'état ferromagnétique à l'état paramagnétique. Par conséquent, des températures plus élevées peuvent rendre les aimants plus faibles. En outre, le magnétisme spontané n'apparaît qu'en dessous de la température de Curie. En outre, ce terme a été nommé d'après Pierre Curie, qui a découvert que le magnétisme se perd à une température critique.

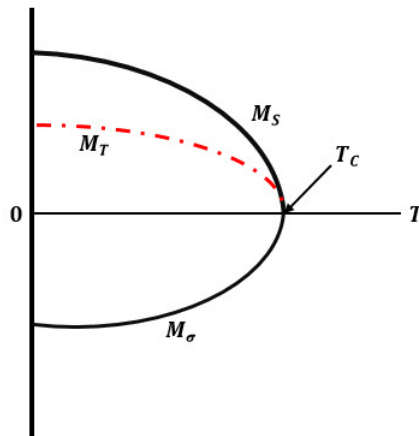


Figure I.23 – Variation thermique d'aimantation totale.

Les températures du point de Curie (T_c) des matériaux magnétiques naturels et synthétiques sont couramment déterminées en magnétisme des roches par plusieurs méthodes de mesure qui peuvent être mutuellement incompatibles et conduire à des résultats incohérents. Ici, les routines d'évaluation communes pour les courbes d'aimantation à haute température et de susceptibilité initiale magnétique sont analysées et révisées sur la base de la théorie de Landau sur les transitions de phase de second ordre. Il est confirmé que dans les courbes d'aimantation à haut champ, la T_c correspond au point d'inflexion, en dessous de la température de courbure maximale ou du point d'intersection de la double tangente. Au moins quatre processus

physiques différents contribuent à la susceptibilité magnétique magnétique initiale près de la température d'ordre. Il s'agit de la variation de l'aimantation de saturation, du comportement superparamagnétique, de la rotation de l'aimantation et du mouvement de la paroi du domaine magnétique. Comme chacun de ces processus peut influencer la position apparente de la T_c , les courbes de susceptibilité initiale et de champ élevé peuvent donner des estimations divergentes de la T_c . Une nouvelle procédure est proposée pour déterminer efficacement la variation de température de plusieurs paramètres magnétiques sur un magnétomètre à échantillon vibrant, en mesurant de façon répétée des quarts de boucles d'hystérésis pendant un seul cycle de chauffage. Cette procédure prend des mesures pendant l'inévitable temps d'attente nécessaire à l'équilibre thermique de l'échantillon, ce qui fait qu'elle n'est pas plus lente que les mesures couramment effectuées sur une balance de Curie. Cependant, elle renvoie l'aimantation de saturation, la rémanence de saturation, les pentes à haut et bas champ, et d'autres paramètres en fonction de la température, qui fournissent des informations indépendantes sur la T_c et d'autres propriétés de l'échantillon [102, 103].

La mesure de la T_c est l'une des techniques centrales du magnétisme des roches. Dans la plupart des applications, c'est une méthode rapide, fiable et éprouvée pour déterminer les minéraux magnétiques prédominants dans les échantillons naturels ou synthétiques, même si leurs concentrations sont faibles. Il en est ainsi pour plusieurs raisons [104]:

- Les mesures magnétiques sont très sensibles, et la présence ou l'absence des champs magnétiques sont très facilement et précisément détectables.
- Les deux oxydes magnétiques naturels les plus courants ont des points de Curie clairement distincts : la magnétite à 580°C , et l'hématite à 680°C montré par Petersen et Bleil en 1982 [105].
- Dans la série commune de minéraux magnétiques naturels en solution solide, les titanomagnétites, les titanomaghémites, les titanohématites et les ferri-ilménites, la température du point de Curie varie sur une large plage de température et peut être utilisée pour contraindre étroitement la composition ou l'état d'oxydation du minéral magnétique [105].

4.2.2 Température de Néel

La température de Néel T_N est la température au-dessus de laquelle certains matériaux antiferromagnétiques deviennent paramagnétiques. Pour être précis, antiferromagnétique signifie que les moments magnétiques du matériau sont alignés selon un schéma régulier. C'est similaire au ferromagnétisme et au ferrimagnétisme. En outre, à la température de Néel, l'énergie de la

chaleur est suffisante pour détruire le schéma régulier des moments magnétiques. En outre, ce terme a été nommé d'après Luis Néel [106].

Les effets de taille finie dans les matériaux magnétiques ferromagnétiques et antiferromagnétiques ont fait l'objet d'une grande attention ces dernières années. Ils reflètent les déviations par rapport aux propriétés de masse lorsque les dimensions de leur échantillon sont réduites. Pour les systèmes présentant de grandes longueurs de corrélation, tels que les supraconducteurs traditionnels dont les longueurs de cohérence sont de l'ordre de centaines d'angströms, la réduction de la température de transition supraconductrice causée par les effets de taille finie a été observée dans de nombreux systèmes. Dans les systèmes fortement corrélés présentant de courtes longueurs de corrélation, tels que les ferromagnétiques et les antiferromagnétiques, les effets de taille finie sur la température de transition magnétique, la température de Curie T_c ou la température de Néel T_N , ne sont visibles que dans les films ultrafins ou les nanoparticules. Dans un modèle simple de la théorie du champ moyen, la température de transition magnétique dépend de la force de l'interaction d'échange et du nombre d'atomes voisins. Par exemple [107, 108].

4.2.3 Comparaison entre la température de Curie et de Néel

Les similitudes :

- La température de Curie et la température de Néel décrivent les propriétés magnétiques de certaines substances.
- De plus, toutes les deux sont des valeurs à haute température.

Les différences : La température de Curie et la température de Néel sont des valeurs de haute température. La principale différence entre la température de Curie et la température de Néel est qu'à la température de Curie, les propriétés magnétiques permanentes de certains matériaux sont perdues alors qu'à la température de Néel, les matériaux antiferromagnétiques deviennent paramagnétiques.

4.2.4 Température de compensation

Une température inférieure à la température de Curie, mais à laquelle les moments magnétiques opposés sont égaux (ce qui donne un moment magnétique net de zéro) est appelée point de compensation de l'aimantation. Ce point de compensation est facilement observé dans les grenats et les alliages de terres rares et de métaux de transition. En outre, les ferrimagnétiques peuvent également avoir un point de compensation du moment angulaire, auquel le moment

angulaire net disparaît. Ce point de compensation T_{comp} est un point crucial pour obtenir une inversion d'aimantation à grande vitesse dans les dispositifs de mémoire magnétique.

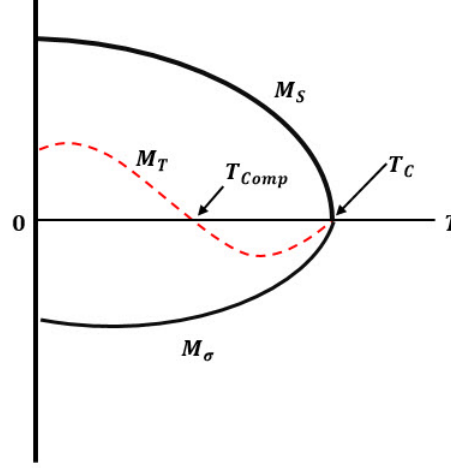


Figure I.24 – Variation thermique d'aimantation totale.

L'aimantation totale devient nulle à la température de compensation T_{comp} , et la température de curie T_c comme nous avons déjà décrit dans le paragraphe précédente. Ainsi, T_{comp} pourrait être atteint avec la recherche du point d'intersection entre les valeurs les plus absolues de deux aimantations de sous-réseau S et σ en utilisant :

$$|M_S(T_{comp})| = |M_\sigma(T_{comp})| \quad (\text{I.51})$$

et

$$\text{sign}(M_S(T_{comp})) = -\text{sign}(M_\sigma(T_{comp})) \quad (\text{I.52})$$

Avec $T_c > T_{comp}$. T_c déterminer à partir du maximum à la courbe thermique de susceptibilité magnétique du système.

Il y'a beaucoup des travaux qui trouvé ce type de température utilisé beaucoup des méthode théoriques tel que, la méthode de Monte Carlo [109–111], la théorie du champ effectif avec corrélations [112, 113], le calcul dynamique de champ moyen [114], le modèle Blume-Capel [115], etc...

4.3 Classification de Néel

Dans la figure I.25 Les dépendances conventionnelles de type Q et R montrent une diminution monotone de l'aimantation avec l'augmentation de la température, la première présentant

une forte diminution de l'aimantation juste au voisinage de la température critique T_c , tandis que la seconde présente déjà une diminution relativement rapide de l'aimantation dans la gamme des températures intermédiaires avant de devenir brusquement nulle au point critique T_c . Une autre dépendance familière de type P montre le maximum induit par la température lorsque la température augmente, tandis que la courbe de type N est caractérisée par deux point d'annulation, la première correspond de la température de compensation T_{com} auquel l'aimantation résultante disparaît en raison de l'annulation complète de l'aimantation du sous-réseau, et la deuxième correspond de la température critiques T_c . La courbe de type L est très analogue à la dépendance de type P , cependant, l'aimantation résultante part de zéro dans ce cas particulier. De même, la dépendance de type M commence également à partir de zéro, mais elle présente deux maxima distincts avant d'atteindre la température critique. La dépendance en forme d'escalier en S présente initialement une forte diminution de l'aimantation qui s'atténue presque complètement dans la plage des températures intermédiaires et, enfin, une deuxième forte diminution suit près de la température critique. Enfin, la courbe de type W présente deux points de compensation (T_{com1}, T_{com2}) avant la température critique T_c [116, 117].

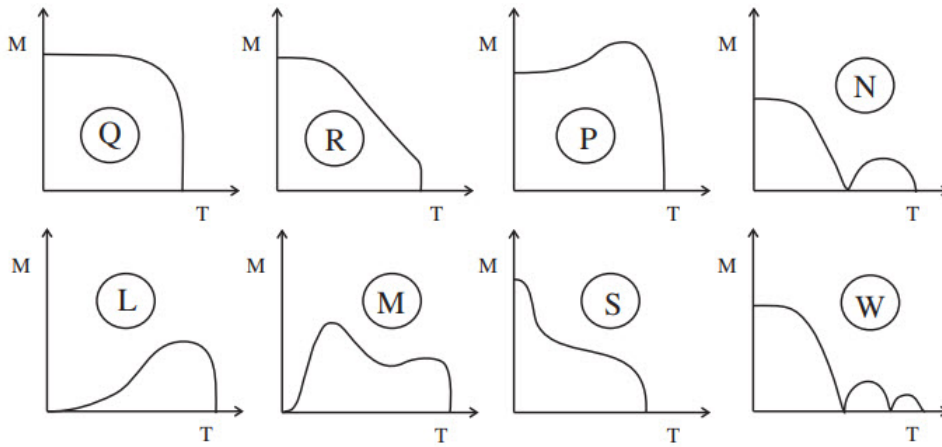


Figure I.25 – Représentation schématique des différents types d'aimantation ferrimagnétique en fonction de la température [116].

5 Propriétés hystérétiques

5.1 Définition

Le cycle d'hystérésis est la courbe qui définit la réponse des matériaux magnétiques, au travers de laquelle, ils gardent la mémoire de tous leurs états d'aimantation précédents à travers les domaines élémentaires. C'est J.A.Ewing qui a mis en évidence ce comportement spécifique dans le cas du fer, et qu'il a appelé hystérésis qui signifie retard de l'effet sur la cause (ici, l'aimantation sur le champ appliqué) [118, 119]. Le cycle d'hystérésis d'un matériau ferromagnétique dépend de la mobilité des parois de Bloch, elle-même fonction des énergies magnétiques et du champ appliqué. Il peut donc être considéré comme une caractéristique magnétique du matériau. L'hystérésis est le retard de la démagnétisation et la déduction de la caractéristique de l'induction magnétique $B(H)$ du matériau magnétique. Le cycle d'hystérésis est donc le tracé de l'induction en fonction du champ H externe appliqué, comme illustré à la figure (I.26) et l'équation (I.4).

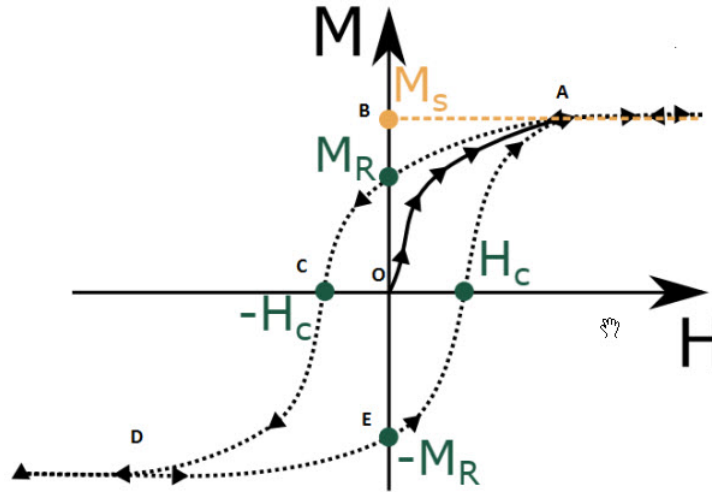


Figure I.26 — (Cycle d'hystérésis) d'un matériau ferromagnétique (ABCDEF). La courbe $M(H)$ pour un matériau initialement démagnétisé (ou première courbe d'aimantation) en trait continu (OA). Différentes quantités: l'aimantation de saturation M_s , le champ coercitif H_c et l'aimantation rémanente M_r .

5.2 Courbe de première aimantation

Lorsqu'on applique un champ magnétique extérieur à ce matériau, les domaines magnétiques dont l'orientation est proche de celle de H augmentent au détriment de ceux dont l'orientation

est opposée à celle de H . Les parois de Bloch se déplacent donc dans le matériau. A la limite, lorsque le champ magnétique externe atteint une valeur critique H_s , le monocristal est constitué d'un seul domaine ferromagnétique dont l'orientation est la même que celle de H ; L'aimantation atteint alors sa valeur maximale M_s appelée aimantation de saturation. Ce phénomène est représenté par la courbe OA de la figure I.26, courbe appelée première aimantation ou courbe de l'aimantation. Chaque cycle d'hystérésis est défini par 4 paramètres [120]. Nous allons définir chacun de ces paramètres en nous référant à la courbe ci-dessus :

- Champ de saturation (H_s): Lorsqu'on applique un champ magnétique externe sur ce matériau, les domaines magnétiques dont l'orientation est proche de celle de H augmentent au détriment de ceux dont l'orientation est opposée à celle de H . A la limite, lorsque le champ magnétique externe atteint une valeur critique H_s , le monocristal n'est constitué que d'un seul domaine ferromagnétique dont l'orientation est la même que celle de H .
- Aimantation de saturation (M_s): L'aimantation à saturation M_s représente la valeur maximale atteinte lorsque le champ magnétique appliqué est fort (voir figure I.26). Tous les moments magnétiques sont alors alignés dans la direction du champ appliqué et on observe une saturation sur la courbe d'aimantation.
- Aimantation de rémanence (M_r): Lorsque l'intensité du champ H diminue jusqu'à zéro, les domaines magnétiques ont tendance à réapparaître (courbe AB voir figure I.26), cependant, comme le déplacement des parois de Bloch n'est pas instantané en raison de l'anisotropie magnétique, une aimantation M_r non nulle se manifeste dans le matériau (point B). Cette valeur M_r est appelée aimantation rémanente.
- Champ coercitif (H_c): Il faut en fait appliquer un champ magnétique opposé à celui du champ de la première aimantation pour que l'aimantation soit nulle (courbe BC , figure I.26). La valeur du champ qui génère cette aimantation nulle correspond au champ coercitif. La valeur de ce champ permet à nouveau de distinguer les grandes classes de matériaux ferromagnétiques. En effet, un matériau doux aura une valeur de champ coercitif faible ($H_c < 1mT$), alors qu'elle sera très élevée pour un matériau dur ($H_c > 60mT$).

La forme de ce cycle dépend de la nature du matériau, des processus de l'aimantation, d'induction et de la géométrie de l'échantillon. Enfin, ce cycle se déforme en fonction des conditions de flux et de fréquence.

L'aire du cycle d'hystérésis représente l'énergie dépensée par unité de volume du matériau, pour réorienter les moments magnétiques des domaines et déplacer les parois de Bloch, pendant un cycle complet de variation du champ magnétique externe. Cette énergie se dissipe sous forme

de chaleur.

5.3 Cycles d'hystérésis magnétiques pour les matériaux doux et durs

5.3.1 Matériaux magnétiques doux

Les matériaux magnétiques doux (voir figure I.27) sont ceux dans lesquels le champ coercitif est faible. Pour ces matériaux, lorsque le champ extérieur varie, aucun obstacle ne s'oppose au déplacement des parois de Bloch et à la réorientation des domaines magnétiques, en d'autres termes ces matériaux présentent peu de défauts dans leur structure cristalline, ainsi qu'une anisotropie réduite. Ils sont caractérisés par une perméabilité très élevée, une aimantation à saturation M_s , un faible champ coercitif et de faibles pertes par hystérésis (faible surface de la boucle d'hystérésis). Un matériau magnétique doux est utilisé lorsqu'il doit canaliser un flux magnétique variable à haute fréquences élevées. Le matériau magnétique doit réagir rapidement et franchement à de faibles variations du champ de l'inducteur sans subir d'échauffement ou sans que sa réaction soit trop sensible à la fréquence du champ. Pour ce but, les matériaux magnétiques doux sont utilisés dans les noyaux (ou circuits magnétiques), les transformateurs, les moteurs, les générateurs, les inductances de précision des circuits électroniques, les bobines d'induction et dans les écrans magnétiques [120].

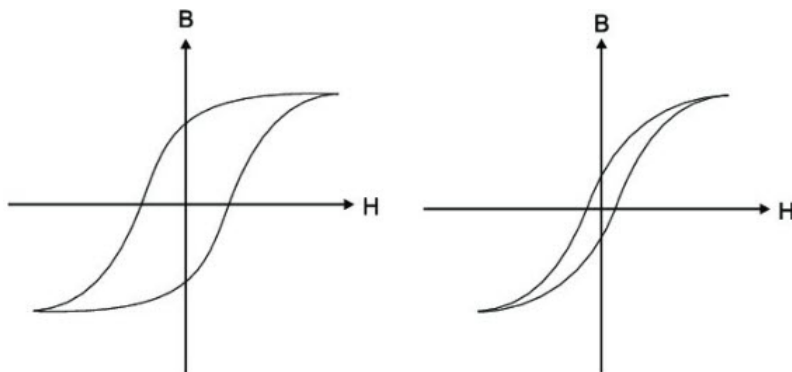


Figure I.27 – Cycle du matériau doux présenté à droite et cycle du matériau dur illustré à gauche [95].

5.3.2 Matériaux magnétiques durs

Les matériaux magnétiques durs (voir figure I.27) sont ceux qui se caractérisent par un champ coercitif élevé, une forte aimantation rémanente et un cycle d'hystérésis large. Sur le

site ces matériaux, on cherche à entraver au maximum la réorientation des moments magnétiques dans les domaines de Weiss, ainsi que le déplacement des parois de Bloch. C'est pourquoi les aciers eutectoïdes à l'état trempé (structure martensitique) sont fréquemment utilisés pour produire des aimants permanents. Ainsi, un aimant permanent de bonne qualité sera caractérisé par une valeur élevée de l'anisotropie magnétique nécessaire à la persistance d'une partie importante de l'aimantation spontanée (rémanente) et par la valeur élevée du champ coercitif. On utilise des matériaux magnétiques durs lorsque le champ magnétique généré par le matériau reste obligatoirement stable dans le temps et reste si possible élevé, et ce en présence de champs magnétiques externes parasites. Ils sont utilisés dans les aimants permanents, les aimants de levage, les noyaux de haut-parleurs, les moteurs électriques de faible puissance, les lentilles magnétiques pour tubes cathodiques [120].

Chapitre II

Modèles de spin et méthodes de calcul

1 Introduction

La physique de la matière condensée s'intéresse particulièrement à l'étude des transitions de phase (magnétique, supraconductrice, superfluide, ferroélectrique, etc.) qui apparaissent dans les systèmes physiques formés d'un très grand nombre de particules fortement couplées. Ces transitions permettent de distinguer les différentes configurations du système considéré, rechercher les domaines d'existence et de déterminer son comportement critique [121].

Les interactions d'échange tendent à aligner ou désaligner les particules (spins) afin de minimiser l'énergie d'échange du système. Elles rendent plus difficile le calcul de la fonction de partition, mais aussi, favorisent l'apparition d'un ordre magnétique spontané local ou global en dessous d'une certaine température, appelée température de Curie pour les systèmes ferromagnétiques, et autre appelée température de Néel pour les systèmes antiferromagnétiques et ferrimagnétiques.

En 1929, Heisenberg a montré que ces interactions sont dues à un effet combiné de la répulsion de Coulomb et du principe d'expulsion de Pauli [122]. En somme, les interactions désignées dans ses systèmes sont une propriété intrinsèque et ne peuvent donc être ignorées ou considérées comme une simple perturbation, en cas des milieux dilués, et c'est précisément la difficulté de leur étude. Deux possibilités sont donc envisageables pour étudier les propriétés des systèmes physiques infinis ou semi-infinis :

- La première consiste à considérer toutes les interactions du système et à déterminer la fonction de partition, en résolvant l'équation de Schrödinger de la mécanique quantique

1989. Le calcul de la fonction de partition consiste à sommer un très grand nombre d'états. A la limite thermodynamique, ce nombre est infini et la somme devient difficile à calculer. Les modèles pour lesquels les fonctions de partition sont des expressions analytiques exactes sont rares.

- Cela conduit à la deuxième possibilité qui néglige les détails non pertinents des interactions entre les particules du système en adoptant un modèle théorique. Les modèles théoriques sont en effet des représentations simplifiées, à l'échelle microscopique, des systèmes physiques (avec N particules en interactions) permettant de les analyser, de les expliquer et de prédire certains aspects macroscopiques.

Plusieurs modèles ont été introduits par les physiciens théoriciens pour étudier les transitions de phases magnétiques dans les systèmes complexes ordonnés et désordonnés. Parmi ces modèles, les plus courants sont : Le modèle d'Heisenberg [122, 123], le modèle d'Ising [124, 125], le modèle de Blume-Capel [126], celui de Potts [127, 128], et le modèle de Blume-Emery-Griffith [129] ou de Baxter-Wu [130, 131], etc. qui peuvent être modifiés selon les besoins d'une étude. Cependant, ces modèles, en plus d'être utilisés pour décrire les systèmes magnétiques pour lesquels ils ont été conçus à l'origine, sont également utilisés dans la description d'autres systèmes tels que les fluides à plusieurs composants et les alliages ternaires [132].

Un autre aspect qui doit impérativement être abordé est l'aspect numérique, car les modèles théoriques décrits précédemment, sont également analysés numériquement et utilisent des approximations ou des méthodes numériques. A juste titre aujourd'hui, en raison des progrès continus de la technologie informatique, la modélisation et la simulation numériques pourraient être considérées comme un troisième levier de la recherche scientifique après la théorie pure et l'expérimentation. En effet, les outils de modélisation et de simulation numériques des matériaux de différentes structures et de leurs propriétés, à différentes échelles sont très utiles et précieux pour le développement des matériaux et de leurs applications. Comme ils offrent une précision acceptable dans la prédiction des propriétés des matériaux, ils sont largement utilisés pour :

- Interpréter les résultats expérimentaux.
- Développer de nouveaux matériaux, difficiles à tester expérimentalement, tels que les nanomatériaux et déterminer leurs propriétés physiques et chimiques.
- Déterminer les propriétés des matériaux dans des conditions extrêmes (température, pression, etc.) inaccessibles expérimentalement.
- Déterminer les propriétés des systèmes complexes qui sont ingérables par des modèles mathématiques microscopiques.
- Comparer la théorie et l'expérimentation et suggérer de faire des tests pour économiser

de l'argent (dans les cas où les calculs sont plus faciles et plus rapides) et du temps ainsi que pour la validation de la théorie.

Le processus simplifié de recherche en modélisation et simulation numériques d'une partie et l'intérêt des modèles numériques: Le chercheur doit traduire les connaissances théoriques (CT) dans le code du modèle de calcul (MDC). Dans le processus de traduction, les termes et les relations de la CT du chercheur sont opérationnalisés en tant que relations structurelles concrètes, variables et conditions initiales du MDC. Le MDC peut être n'importe quel type d'approche mathématique ou computationnelle et nécessite une spécificité complète avant de fonctionner.

Les outils de modélisation tels que les méthodes modernes de structure électronique, la théorie d'approximation du champ moyen (MFA), la théorie du champ effectif (EFT) et les simulations de Monte Carlo (MC) se sont avérés être le produit de décennies de recherches intenses, stimulées par au moins deux facteurs d'égale importance : Premièrement, les puissants algorithmes numériques qui constituent des éléments essentiels des outils de physique numérique, notamment les codes de structure électronique modernes. Certains de ces algorithmes sont les plus populaires et sont classés dans le top 10 des algorithmes du 20^{ème} siècle [132], comme l'algorithme de Metropolis, méthode simplex, méthode du sous-espace de Krylov, l'approche décompositionnelle du calcul matriciel, le compilateur optimisant Fortran, Algorithme QR, tri rapide : Quicksort (en anglais), transformée de Fourier rapide, détection des relations entre les nombres entiers et méthode multipolaire rapide.

Le deuxième facteur est l'augmentation spectaculaire des capacités matérielles et de stockage des systèmes informatiques modernes grâce à la miniaturisation des dispositifs microélectroniques. En 1965, la loi de Moore prévoyait une croissance exponentielle de la puissance de calcul lorsque des dispositifs microélectroniques plus petits que la gamme sublithographique seraient produits.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux modèles et méthodes de simulation que nous appliquerons à l'étude des systèmes physiques bien définis. Tout d'abord, dans la première section nous rappelons la différence entre le modèle de spin classique et le modèle de spin quantique, sans toutefois revenir sur la description du spin qui précédemment abordée au premier chapitre, et nous décrivons quelques modèles de spin, tel que le modèle d'Ising, le modèle de Potts, le modèle Blume-Emery-Griffiths et les modèles de spin continu. Dans la deuxième section, nous définirons la méthode de Monte Carlo et ses principes. Enfin dans la dernière section, nous traiterons différentes algorithmes de calcul tel que l'algorithme de Métropolies, l'algorithme de Wolff, l'algorithme de Swendsen-Wang et l'algorithme de Niedermayer.

2 Modèles de spin quantiques et classiques

Les modèles de spin dépendent essentiellement des degrés de liberté et des interactions atomiques observés dans le système considéré. Il existe plusieurs modèles de spin, ils peuvent être de nature quantique ou classique :

- Les modèles de spins classiques sont des modèles de spins discrets, c'est-à-dire que les spins ne peuvent prendre que des valeurs finies. Comme pour le modèle d'Ising [124, 125] et du modèle de Potts [127, 128].
- D'autre part, les modèles de spin quantiques sont des modèles de spin continus ; le spin peut théoriquement prendre un nombre infini de valeurs, formant un ensemble continu. Très souvent, ils sont désignés par des classiques. Parmi les modèles quantiques de spin, on peut citer : Le modèle XY à vecteurs unitaires 2D [133], le modèle classique de Heisenberg à vecteurs unitaires 3D [123], les modèles de Baxter [131], etc.

2.1 Modèle d'Ising

En 1920, W. Lenz a proposé à l'un de ses étudiants, Ernst Ising, un modèle de spin simple pour expliquer qualitativement les transitions de phase ferromagnétiques paramagnétiques dans un système magnétique unidimensionnel [133]. Ising a développé et résolu exactement par la méthode de la matrice de transfert (calcul élémentaire) ce modèle qui porte maintenant son nom et l'a présenté dans sa thèse en 1925 [124].

Le modèle d'Ising est défini comme un modèle simple extrêmement efficace pour étudier quantitativement et qualitativement les transitions de phase, en particulier dans les systèmes magnétiques. Il est basé sur la représentation du système étudié sous la forme d'un réseau fixe de particules ayant un moment magnétique, discernables et soumises à des interactions d'échange et de champ extérieur. L'hamiltonien qui décrit le modèle est :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_{\langle i \rangle} S_i \quad (\text{II.1})$$

Où, le premier terme est la somme des interactions entre les spins proches voisins. J est l'interaction d'échange entre les spins S_i et S_j des sites i et j du réseau si :

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

Le deuxième terme d'hamiltonien est celui de la sommation sur l'interaction de chaque spin S_i du réseau avec le champ magnétique externe appliqué h , si :

- $h > 0$, le spin S_i est aligné parallèlement à h ,
- $h < 0$, le spin S_i est aligné de manière antiparallèle à h ,
- $h = 0$ Aucun champ magnétique externe n'est appliqué.

Il est connu que le ferromagnétisme est un comportement qui résulte toutes les interactions entre les spins électroniques des atomes. En considérant que le moment magnétique est appliqué à chaque spin atomique, cette interaction ne provient pas du couplage entre les dipôles magnétiques mais plutôt de l'interaction d'échange qui implique le principe d'exclusion de Pauli et la répulsion électrostatique entre les deux électrons. Donc, on pourrait s'attendre à ce que l'énergie de deux électrons de spins parallèles soit inférieure à celle de deux électrons de spins antiparallèles. Cette différence d'énergie électrostatique entraîne l'imposition du couplage entre les spins avec une interaction d'échange notée J , comme décrit ci-dessus.

La résolution du modèle d'Ising, à l'origine, a été effectuée dans un système 1D, et plus tard, le modèle d'Ising 2D a été résolu analytiquement dans un champ nul, dans le sens du calcul exact de l'énergie libre par Lars Onsager, en 1944 [134]. Aujourd'hui, ce modèle est facilement soluble en 3D. À 1D, la susceptibilité magnétique reste finie à toute température non nulle, de sorte que le modèle d'Ising unidimensionnel ne présente pas des transitions de phase [135]. En 2D, l'existence des transitions de phase se manifeste par un comportement singulier des fonctions thermodynamiques ou de leurs dérivées. En 1955, Lee Yang confirme cette transition de phase en calculant la capacité thermique et l'aimantation lorsque le champ externe est nul.

La résolution du modèle d'Ising en 3D n'est réalisée que par des solutions approximatives. De nombreuses approches ont été développées pour étudier les propriétés magnétiques des systèmes 3D et pour déterminer les grandeurs magnétique et thermodynamiques telles que l'aimantation totale et partielle, la susceptibilité magnétique, la chaleur spécifique, l'énergie interne, la température critique, les exposants critiques et les transitions de phase.

2.2 Modèle de Potts

Il s'agit d'une revue didactique sur les propriétés statiques du modèle de Potts [128]. Le modèle de Potts généralise celui d'Ising [125] à plus de deux composants, et a fait l'objet d'un intérêt des recherches croissantes ces dernières années. Historiquement, une version à quatre composantes du modèle a été étudiée pour la première fois par Ashkin et Teller en 1943 [136]. Mais le modèle à Q composantes générales porte son nom actuel après avoir été proposé par Domb en son étudiant Potts comme sujet de thèse [128]. Le problème a également été examiné deux ans plus tard dans une étude indépendante par Kihara et al. en 1954 [137].

Le problème a suscité peu d'intérêt au cours des premières années. Mais depuis décennie,

il a connu un fort regain d'intérêt, en grande partie parce que le modèle s'est avéré très riche dans son contenu. On sait maintenant que le modèle de Potts est lié à de nombreux problèmes remarquables dans le domaine de la statistique des réseaux ; le comportement critique s'est également révélé plus riche et plus général que celui du modèle d'Ising. Dans les efforts qui ont suivi pour explorer ses propriétés, le modèle de Potts est devenu un important banc d'essai pour les différentes méthodes et approches de l'étude de la théorie du point critique.

Le modèle de Potts est présenté [125], et généralisé du modèle [128], et examiné par plusieurs autres modèles, dont le modèle XY [133], le modèle de Heisenberg et le modèle N -vecteur [123]. Le modèle de Potts à portée infinie est connu sous le nom de modèle de Kac. Lorsque les spins sont considérés comme interagissant de manière non abélienne, le modèle est lié au modèle du tube de flux, qui est utilisé pour discuter du confinement en chromodynamique quantique. Des généralisations du modèle de Potts ont également été utilisées pour modéliser la croissance des grains dans les métaux et le grossissement dans les mousses. Une autre généralisation de ces méthodes par James Glazier et Francois Graner [138], connue sous le nom de modèle cellulaire de Potts, a été utilisée pour simuler des phénomènes statiques et cinétiques dans la mousse et la morphogénèse biologique.

Le problème proposé à l'origine par Domb était de considérer le modèle d'Ising comme un système de spins en interaction qui peuvent être soit parallèles soit antiparallèles [128]. Une généralisation appropriée serait alors de considérer un système de spins confinés dans un plan, chaque spin pointant vers l'une des Q directions équidistantes spécifiées par les angles :

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{Q} \quad (\text{II.2})$$

Où $n = 0, 1, \dots, Q - 1$. Dans sa forme la plus générale, l'interaction entre les plus proches voisins ne dépend que de l'angle relatif entre les deux vecteurs. Ce système est généralement connu comme un système de symétrie $Z(q)$ dont l'hamiltonien est :

$$\mathcal{H}_c = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_c(\theta_{ij}) \quad (\text{II.3})$$

Où la fonction $J(\theta)$ est 2π périodique et $\theta_{ij} = \theta_{n_i} - \theta_{n_j}$ est l'angle entre les deux spins aux sites voisins i et j . Le modèle $Z(q)$ joue un rôle essentiel dans les théories de jauge du réseau et a suscité un intérêt croissant par exemple, une revue par Kogut en 1979 [139].

Le modèle proposé par Domb [128] consiste à choisir :

$$J(\theta) = -\varepsilon_1 \cos(\theta) \quad (\text{II.4})$$

Alors l'hamiltonien devient :

$$\mathcal{H}_c = \varepsilon_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_{n_i} - \theta_{n_j}) \quad (\text{II.5})$$

La somme étant calculée sur les paires de voisins les plus proches $\langle i, j \rangle$ sur tous les sites du réseau. Les couleurs des sites se prennent des valeurs dans $1, \dots, Q$. Ici, ε_1 est une constante de couplage, identifiant la force d'interaction. Ce modèle est aujourd'hui connu sous le nom de modèle vectoriel de Potts ou de modèle d'horloge [105]. Potts a fourni la localisation en deux dimensions de la transition de phase, pour $Q = 3$ et 4 . Dans la limite où $Q \rightarrow \infty$, cela devient le modèle XY [133].

En utilisant une analyse de type Kramer-Wannier traité en 1941 [140], Potts a pu déterminer le point critique de ce modèle sur le réseau carré pour $Q = 2, 3, 4$. Bien qu'il n'ait pas été en mesure d'étendre cette découverte à $Q > 4$, Potts a signalé comme remarque à la fin de son article en 1952 [128] le point critique pour tous les Q du modèle suivant :

$$J(\theta_{ij}) = \varepsilon_2 \delta_{ij}(n_i, n_j) \quad (\text{II.6})$$

Ce qui est maintenant connu comme le modèle standard de Potts a été suggéré par Potts au cours de son étude ci-dessus, et utilise un hamiltonien plus simple, donné par :

$$\mathcal{H}_{Potts} = -\varepsilon_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{ij}(n_i, n_j) \quad (\text{II.7})$$

Où $\delta(n_i, n_j)$ est le delta de Kronecker, qui est égal :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ 0 & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (\text{II.8})$$

Le modèle (standard) de Potts est ferromagnétique si $\varepsilon_2 > 0$ et antiferromagnétique si $\varepsilon_2 < 0$. L'interaction (II.4) peut être formulée alternativement pour refléter sa symétrie complète dans un espace de dimension $Q - 1$. Ceci est réalisé en écrivant dans l'équation II.5.

$$\delta_{ij}(\alpha, \beta) = \frac{1}{q} \left[1 + (q - 1) e^{\alpha \cdot \beta} \right], \quad (\text{II.9})$$

Où e^α , $\alpha = 0, 1, \dots, Q-1$ sont Q vecteurs unitaires pointant dans les Q directions symétriques d'un hypertétraèdre en $Q - 1$ dimensions. L'hamiltonien sous la forme de II.5 et II.7 s'est avéré pratique à utiliser dans la formulation à spin continu du modèle de Potts par exemple, publié par Zia et Wallace en 1975 [141].

Le modèle planaire et le modèle standard sont identiques pour $Q = 2$ [125] et $Q = 3$ avec $\varepsilon_2 = 2\varepsilon_1$ et $\varepsilon_2 = 3\varepsilon_1/2$, respectivement. De même, le modèle planaire à quatre états est réductible aux modèles $Q = 2$ introduit par Betts en 1964 [142] et cette équivalence est valable pour des réseaux arbitraires présenté par Kasteleyn en 1964 [143]. Il n'existe aucune relation apparente entre le modèle planaire et le modèle standard pour $Q = 4$.

2.3 Modèle de Blume-Emery-Griffiths

Le modèle de Blume-Emery-Griffiths (BEG) [144] représente un important modèle d'un réseau de spin en mécanique statistique. C'est l'un des rares et certainement l'un des plus simples modèles connus à présenter, dans sa version à champ moyen, à la fois une transition de phase continue du second ordre et une transition de phase discontinue du premier ordre. En raison de cette propriété, le modèle a été largement étudié comme modèle de nombreux systèmes divers, y compris les mélanges - le système pour lequel Blume, Emery et Griffiths ont été les premiers à concevoir leur modèle, pour étudier plusieurs phénomènes ainsi que des systèmes solide-liquide-gaz, des microémulsions, des alliages de semi-conducteurs, des modèles de conduction électronique et les diagrammes de phase d'une classe de modèles comprenant le modèle de Blume-Emery-Griffiths. D'un point de vue plus théorique, le modèle BEG a également joué un rôle important dans le développement de la théorie de renormalisation de groupe du modèle de Potts, et présentant une description simple mais une structure de transition de phase relativement compliquée, le modèle BEG continue de présenter un intérêt pour les études modernes de mécanique statistique.

Le modèle Blume-Emery-Griffiths est décrit par l'hamiltonien BEG :

$$\mathcal{H}_{BEG} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta_i \sum_i S_i^2 - h \sum_i S_i \quad (\text{II.10})$$

Où $\langle i, j \rangle$ les deux premières sommes sont sur toutes les paires plus proches voisines sur un réseau, les deux dernières sur tous les sites et $S_i = \pm 1, 0$. J est le paramètre d'échange, K est l'interaction biquadratique et Δ_i est un champ cristallin dépendant du site ($\Delta_i = \Delta$ pour le modèle pur), et h est le champ magnétique externe.

2.4 Modèles de spin continu

Une généralisation différente du modèle d'Ising nous donne les modèles à spin continu, dans lesquels les spins sur le réseau ont une gamme continue de valeurs, plutôt qu'un spectre discret comme les modèles d'Ising et de Potts. Les plus étudiés sont le modèle XY [133, 145] et celui de

Heisenberg [123, 146]. Dans le premier, les spins définis par des vecteurs à deux composantes de longueur unitaire, pouvant pointer dans n'importe quelle direction sur un plan bidimensionnel.

Ainsi, les spins peuvent être représentés par leurs composantes S_x, S_y , avec la contrainte que $S^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 = 1$, où ils peuvent être représentés par une seule variable d'angle θ , qui enregistre la direction dans laquelle le spin pointe. Notez que bien que les spins soient bidimensionnels, il n'y a aucune raison pour que le réseau soit nécessairement bidimensionnel. Par exemple, nous pouvons placer des spins XY sur un réseau cubique en trois dimensions si nous le souhaitons.

Le modèle d'Heisenberg suit la même idée, mais les spins sont des vecteurs unitaires tridimensionnels. (Encore une fois, la dimensionnalité des spins et celle du réseau sont indépendantes. On peut par exemple placer des spins de Heisenberg sur un réseau à deux dimensions). Les spins d'Heisenberg peuvent être représentés soit comme des vecteurs à trois composantes avec $S^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 1$, soit par deux variables angulaires, comme les θ et φ des coordonnées sphériques.

L'hamiltonien de modèles XY est la généralisation évidente de l'hamiltonien d'Ising :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (\text{II.11})$$

Où S_i et S_j sont les vecteurs représentant les spins sur les sites i et j . Lorsque $J > 0$, les spins peuvent diminuer leur énergie en s'alignant les uns sur les autres et le modèle est ferromagnétique, tout comme dans le cas d'Ising. Lorsque $J < 0$, le modèle est antiferromagnétique. h est le champ magnétique externe.

3 Simulations de Monte-Carlo

3.1 Introduction

La méthode de Monte Carlo a été conceptualisée par S. Ulam et N. Metropolis [20] après 1944 pour étudier la diffusion des neutrons dans une matière fissile, c'est-à-dire dans le cadre du projet Manhattan (un projet secret initié par le Département de la Défense des Etats-Unis pour la recherche sur la fabrication de la bombe atomique). N. Metropolis et al [21] ont réalisé la simulation informatique d'un liquide simple (disques durs se déplaçant en 2D) en utilisant des méthodes probabilistes et ont ainsi proposé le nom de " Monte Carlo " en référence au célèbre casino de Monaco. D'autres chercheurs, Alder et Wainwright [147], ont à leur tour réalisé la simulation de sphères dures en se focalisant sur la transition de phase solide-liquide et ont observé la convergence des propriétés vers l'équilibre. Les simulations de Monte Carlo se sont

ensuite exportées dans plusieurs domaines autres que la physique : En économie, les techniques de simulation de Monte Carlo sont utilisées pour modéliser des phénomènes présentant un fort degré d'incertitude des données initiales, comme le calcul du capital-risque. Dans l'industrie, les problèmes de l'exploration spatiale et de l'exploitation pétrolière ont été abordés.

En mathématiques, pour évaluer des intégrales multidimensionnelles dans le cas de limites compliquées. En physique, pour déterminer les propriétés thermodynamiques, magnétiques, de transport, etc. des systèmes. Les techniques de simulation de Monte Carlo suivent un régime commun quel que soit le domaine d'application :

- Définir un jeu de données initial
- Établir un processus aléatoire pour générer les données initiales selon une distribution de probabilité.
- Calculer les quantités selon un cadre déterministe, une fois l'équilibre atteint.
- Collectez les résultats.

3.2 Principes de la simulation de Monte-Carlo

3.2.1 Estimateur

L'objectif habituel de la simulation de Monte Carlo d'un système thermique est le calcul de la valeur d'espérance $\langle Q \rangle$ d'une certaine quantité observable Q , telle que l'énergie interne dans un modèle de gaz, ou l'aimantation dans un modèle magnétique, la méthode idéale pour calculer une telle espérance est de calculer la moyenne de la quantité d'intérêt sur tous les états μ du système, en pondérant chacun d'eux par sa probabilité de Boltzmann.

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \quad (\text{II.12})$$

Où $e^{-\beta E_{\mu}}$ est le facteur de Boltzmann, qui est la densité de probabilité de l'ensemble canonique [148]. $\beta = \frac{1}{K_B T}$ avec K_B la constante de Boltzmann. T est la température du système. E_{μ} est l'énergie potentielle.

Dans la pratique, il convient de mettre l'accent sur les considérations suivantes :

1. La simulation commence initialement à une température presque nulle, dans la phase ordonnée d'une configuration magnétique initiale.
2. Une séquence aléatoire d'états accessibles (chaîne de Markov) est générée dans l'espace des configurations du système.

3. Nous échantillonnons en favorisant les zones de cet espace où le facteur de Boltzmann est le plus grande (le cas d'algorithme de Metropolis).
4. La probabilité d'une configuration particulière de l'énergie potentielle E_μ est donc proportionnelle à $e^{-\beta E_\mu}$. En d'autres termes, l'acceptation d'une configuration de la chaîne de Markov est pondérée par une fréquence proportionnelle au facteur de Boltzmann.
5. La probabilité d'une configuration particulière de l'énergie potentielle E_μ est alors proportionnelle à $e^{-\beta E_\mu}$. Une propriété d'équilibre est alors obtenue comme une simple moyenne sur les configurations acceptées.

En résumé, le principe de la simulation de Monte Carlo repose sur les idées de base suivantes [149–151]:

3.2.2 Échantillon important

La méthode de Monte-Carlo thermique consiste à choisir un échantillon, c'est-à-dire un ensemble fini contenant les états dominants (stables). Ce principe est appelée : L'échantillon important [152]: Elle est basée sur la chaîne de Markov [153]. Le processus de la chaîne de Markov consiste à générer une série de configurations où les propriétés thermodynamiques et structurales sont obtenues en calculant les moyennes des quantités concernées selon la distribution de Boltzmann [154] sous les termes suivants :

1. Un très grand nombre de configurations sont générées.
2. Le passage du système entre deux états accessibles pendant la simulation se fait de manière aléatoire.
3. La probabilité de trouver le système dans un état donné est équivalente de cet état dans les systèmes réels.
4. Si le poids de Boltzmann est important, il est considéré comme la probabilité de passage. Il semble alors nécessaire de définir la règle de passage d'un état à un autre : C'est la dynamique de la simulation. Dans la simulation de Monte Carlo, elle est régie par l'équation maîtresse II.13 qui donne la variation de probabilité pour chaque état :

$$\frac{dp_\alpha}{dt} = \sum_b \{P_b(t) * W(b \longrightarrow a) - P_a(t) * W(a \longrightarrow b)\} \quad (\text{II.13})$$

Où, $P_{a(b)}$ est la probabilité que le système soit dans l'état $a(b)$.

$W(a \longrightarrow b)$ est la probabilité de passage (transition) entre a et b . $W(a \longrightarrow b)$ doit satisfaire à la condition suivante :

$$\sum_a W(a \longrightarrow b) = 1 \quad (\text{II.14})$$

5. Lorsqu'une particule quitte un état, la probabilité de cet état diminue. Cependant, lorsqu'elle atteint cet état, la probabilité de cet état augmente.

L'idée est de favoriser les états où $P_{a(b)}$ a des valeurs supérieures à ceux où elles sont proches de zéro ; car il est difficile de calculer la moyenne d'une quantité physique G dans un ensemble infini. En effet, ce calcul conduit à des imprécisions en raison du grand nombre de degrés de liberté du système. En considérant un échantillon, $F = a_1, a_2, \dots, a_N$ contenant N états a , l'estimation de la quantité Q (donnée par l'équation II.14) de l'échantillon peut être calculée.

$$Q_F = \frac{\sum_{i=1}^N \left(\frac{Q_{a,i}}{P_{a,i}} \right) * e^{-\beta E_{a,i}}}{\sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{P_{a,j}} \right) * e^{-\beta E_{a,i}}} \quad (\text{II.15})$$

Lorsque $N \rightarrow \infty$, l'estimation de la quantité Q devient équivalente à sa moyenne, $Q_F = \langle Q \rangle$. Les états de l'échantillon ne sont pas équiprobables, mais distribués selon la loi de probabilité :

$$P_{a,i,j} = e^{-\beta E_{k,i,j}} / Z \quad (\text{II.16})$$

Où Z est la fonction de partition.

Par conséquent, pour améliorer l'estimation, Q_F , nous choisissons cette distribution de probabilité. C'est la forme la plus connue de l'échantillon important.

$$Q_F = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_{k,i} \quad (\text{II.17})$$

Ce qui est mieux que lorsque tous les états sont équiprobables.

L'achèvement du processus de Markov requiert deux conditions supplémentaires, à savoir l'ergodicité et l'équilibre détaillé.

3.2.3 Ergodicité

La condition d'ergodicité est qu'au cours du processus de Markov, le système peut, à un état donné, passer, par n'importe quel état après un long temps. Si, par exemple, toutes les probabilités de transition d'un état donné sont nulles, alors l'ergodicité est violée. Il en résulte qu'à l'équilibre, la moyenne d'une grandeur calculée statistiquement est égale à la moyenne d'un plusieurs mesures faites séparément. La première valeur est celle que l'on peut mesurer

expérimentalement. L'hypothèse ergodique est donc fondamentale pour une bonne connexion entre la théorie et l'expérience.

3.2.4 Balance détaillée

Elle garantit que le système est en équilibre et y reste par la distribution de Boltzmann et non par une autre. Les particules qui quittent l'équilibre sont remplacées par un nombre égal de celles qui y arrivent. là. Cela se traduit par l'équation II.18:

$$\sum_a P_a * W(a \rightarrow b) = \sum_b P_b * W(b \rightarrow a) \quad (\text{II.18})$$

De l'équation II.14, nous obtenons ensuite :

$$\sum_a P_a * W(a \rightarrow b) = P_a = \sum_b P_b * W(b \rightarrow a) \quad (\text{II.19})$$

Pour tout ensemble de probabilités de transitions qui satisfait l'équation II.19, la distribution P_a constitue un état d'équilibre à partir des transitions observées dans le processus de Markov (stationnaire). Malheureusement, la satisfaction de cette équation n'est pas garante de l'obtention de P_a à partir de n'importe quel état du système [154, 155]. Ceci peut être facilement être démontré en considérant que $W(b \rightarrow a)$ sont les éléments de la matrice de Markov M .

Nous écrivons:

$$q_b(t+1) = \sum_a W(a \rightarrow b) * q_a(t) \quad (\text{II.20})$$

Sous forme de matrice :

$$Q(t+1) = M * Q(t) \quad (\text{II.21})$$

Lorsque le processus de Markov atteint l'équilibre, nous trouvons :

$$Q(\infty) = M * Q(\infty) \quad (\text{II.22})$$

Si le processus atteint un cycle limite :

$$Q(\infty) = M^n * Q(\infty) \quad (\text{II.23})$$

Où, n est la taille du cycle.

Dans ces conditions, il apparaît que l'équation II.19 ne garantit pas l'équilibre. Pour surmonter cette difficulté, nous imposons la condition de l'équilibre détaillé, reprise de II.19, qui a l'avantage de d'éliminer le cycle limite :

$$P_a * W(a \rightarrow b) = P_a = P_b * W(b \rightarrow a) \quad (\text{II.24})$$

Si le processus atteint un cycle limite :

A l'équilibre, $Q(t)$ tend vers $P_{a(b)}$ lorsque t tend vers l'infini. Les systèmes réels obéissent à l'équilibre détaillé [156].

A partir de l'équation II.24, on peut écrire :

$$\frac{W(a \rightarrow b)}{W(b \rightarrow a)} = \frac{P_b}{P_a} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{II.25})$$

Cela montre que la distribution de Boltzmann est la distribution observée à l'équilibre. Ainsi, les équations (II.24) et (II.25) sont des conditions obligatoires qui déterminent le choix de la probabilité de transition $W(a \rightarrow b)$.

3.2.5 Taux d'acceptation

Lors du passage d'un état à un autre, un rapport d'acceptation doit être défini. Il permet de trouver les bonnes probabilités de transition de tout processus de Markov. La condition $W(a \rightarrow b) \neq 0$ est autorisée. Elle satisfait toujours le bilan détaillé quelle que soit sa valeur [156]. En posant la probabilité de transition comme :

$$W(a \rightarrow b) = \pi(a \rightarrow b) * R(a \rightarrow b) \quad (\text{II.26})$$

Où, $\pi(a \rightarrow b)$ est la probabilité de sélection ; probabilité que l'algorithme génère l'état b à partir de a . $R(a \rightarrow b)$ est la probabilité d'acceptation de ce changement de configuration. L'acceptation est arbitraire entre 0 et 1 si $R(a \rightarrow b) = 0$, pour toutes les transitions, alors $W(a \rightarrow b) = 1$. Cela nous permet de choisir librement la probabilité de sélection :

$$\frac{W(a \rightarrow b)}{W(b \rightarrow a)} = \frac{\pi(a \rightarrow b) * R(a \rightarrow b)}{\pi(b \rightarrow a) * R(b \rightarrow a)} \quad (\text{II.27})$$

Avec $\frac{R(a \rightarrow b)}{R(b \rightarrow a)} \in [0, +\infty[$, tandis que $\pi(a \rightarrow b)$ et $\pi(b \rightarrow a)$ peuvent prendre des valeurs quelconques. Pour éviter que l'algorithme soit lent, nous choisissons l'acceptation proche de 1. Le meilleur algorithme ajuste bien $\pi(a \rightarrow b)$ et met $R(a \rightarrow b) \simeq 1$ [148, 152].

4 Algorithmes de calcul

4.1 Algorithme de Metropolis

Le tout premier algorithme de Monte Carlo que nous présentons dans ce chapitre est le plus célèbre et le plus utilisé de tous, l'algorithme de Metropolis, qui a été introduit par Nicolas Metropolis et ses collègues dans un article de 1953 sur les simulations de gaz de sphères dures [21]. Nous utiliserons cet algorithme pour démontrer plusieurs des concepts généraux impliqués dans un véritable calcul de Monte Carlo, notamment l'équilibrage, la mesure des valeurs espérées et le calcul des erreurs. Cependant, voyons d'abord comment l'algorithme a été élaboré et comment on peut l'implémenter sur un ordinateur.

La dérivation de l'algorithme de Metropolis suit exactement le plan que nous avons décrit à la section précédente de taux d'acceptation. Nous choisissons un ensemble de probabilités de sélection $\pi(a \rightarrow b)$, une pour chaque transition possible d'un état à un autre, $a \rightarrow b$, puis nous choisissons un ensemble de probabilités d'acceptation $R(a \rightarrow b)$ tel que l'équation II.27 satisfasse la condition d'équilibre détaillé tel que l'équation II.25. L'algorithme fonctionne en choisissant de manière répétée un nouvel état b , puis en l'acceptant ou en le rejetant au hasard avec la probabilité d'acceptation que nous avons choisie. Si l'état est accepté, l'ordinateur fait passer le système dans le nouvel état b . Dans le cas contraire, il le laisse tel quel. Et le processus est répété encore et encore.

Les probabilités de sélection $\pi(a \rightarrow b)$ doivent être choisies de manière à ce que la condition d'ergodicité - l'exigence selon laquelle chaque état doit être accessible à partir de chaque autre en un nombre d'étapes fini - soit remplie. Cela nous laisse encore une grande latitude quant à la façon dont ils sont choisis; étant donné un état initial a , nous pouvons générer un nombre quelconque d'états candidats b en retournant simplement différents sous-ensembles de spins sur le réseau. Les énergies des systèmes en équilibre thermique restent dans une plage très étroite, les fluctuations d'énergie sont faibles par rapport à l'énergie du système entier. Autrement dit, le système réel passe la plupart de son temps dans un sous-ensemble d'états avec une gamme étroite d'énergies et effectue rarement des transitions qui changent radicalement l'énergie du système. Cela nous indique que nous ne voulons probablement pas passer beaucoup de temps dans notre simulation à considérer les transitions vers des états dont l'énergie est très différente de l'énergie de l'état actuel. La façon la plus simple d'y parvenir dans le modèle d'Ising est de ne considérer que les états qui diffèrent de l'état actuel par le retournement d'un seul spin. On dit d'un algorithme qui procède ainsi qu'il a une dynamique de retournement de spin unique. L'algorithme que nous décrivons dans cette partie possède une dynamique de retournement

d'un seul spin, bien que ce ne soit pas ce qui en fait l'algorithme de Metropolis (Le choix particulier du taux d'acceptation qui caractérise l'algorithme de Metropolis. Notre algorithme serait toujours un algorithme de Metropolis même s'il retournerait de nombreux spins en même temps) [156].

L'utilisation de la dynamique de retournement d'un seul spin garantit que le nouvel état b aura une énergie E_b différente de l'énergie actuelle E_a d'au plus $2J$ pour chaque liaison entre le spin que nous retournons et ses voisins [157]. Par exemple, sur un réseau carré en deux dimensions, chaque spin a quatre voisins, de sorte que la différence maximale d'énergie serait de $8J$. L'expression générale est $2zJ$, où z est le nombre de coordination du réseau, c'est-à-dire le nombre de voisins de chaque site sur le réseau et J l'interaction d'échange. L'utilisation de la dynamique de retournement d'un seul spin garantit également que notre algorithme obéit à l'ergodicité, puisqu'il est clair que nous pouvons passer de n'importe quel état à n'importe quel autre sur un réseau fini en retournant un par un chacun des spins par lesquels les deux états diffèrent.

Dans l'algorithme de Metropolis, les probabilités de sélection $\pi(a \rightarrow b)$ pour chacun des états possibles b sont toutes choisies égales. Les probabilités de sélection de tous les autres états sont fixées à zéro. Supposons qu'il y ait N spins dans le système que nous simulons. Avec une dynamique de retournement d'un seul spin, il y a alors N spins différents que nous pouvons retourner, et donc N états possibles b que nous pouvons atteindre à partir d'un état donné a . Il y a donc N probabilités de sélection $\pi(a \rightarrow b)$ qui sont non nulles, et chacune d'entre elles prend la valeur :

$$\pi(a \rightarrow b) = \frac{1}{N} \quad (\text{II.28})$$

Avec ces probabilités de sélection, la condition d'équilibre détaillé tel que l'équation (II.25), prend la forme:

$$\frac{W(a \rightarrow b)}{W(b \rightarrow a)} = \frac{\pi(a \rightarrow b) * R(a \rightarrow b)}{\pi(b \rightarrow a) * R(b \rightarrow a)} = \frac{R(a \rightarrow b)}{R(b \rightarrow a)} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{II.29})$$

Nous devons maintenant choisir les rapports d'acceptation $R(a \rightarrow b)$ pour satisfaire cette équation, une possibilité est de choisir:

$$R(a \rightarrow b) = R_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{II.30})$$

La constante de proportionnalité R_0 s'annule dans l'équation (II.30), nous pouvons donc lui donner la valeur que nous voulons, sauf que $R(a \rightarrow b)$ étant une probabilité ne doit jamais être supérieure à un. Comme nous l'avons mentionné ci-dessus, la plus grande différence d'énergie

$E_b - E_a$ que nous pouvons avoir entre nos deux états est de $2zJ$, où z est le nombre de coordination du réseau. Cela signifie que la valeur maximale de $e^{-\frac{1}{2}\beta(E_b-E_a)}$ est $e^{\beta zJ}$. Ainsi, afin d'être certain $R(a \rightarrow b) \leq 1$, nous voulons choisir :

$$R_0 = e^{-\beta zJ} \quad (\text{II.31})$$

Pour rendre l'algorithme aussi efficace que possible, nous voulons que les probabilités d'acceptation soient aussi grandes que possible, donc nous faisons en sorte que R_0 soit aussi grand qu'il est autorisé à l'être, ce qui nous donne :

$$R(a \rightarrow b) = e^{-\frac{1}{2}\beta(E_b-E_a+2zJ)} \quad (\text{II.32})$$

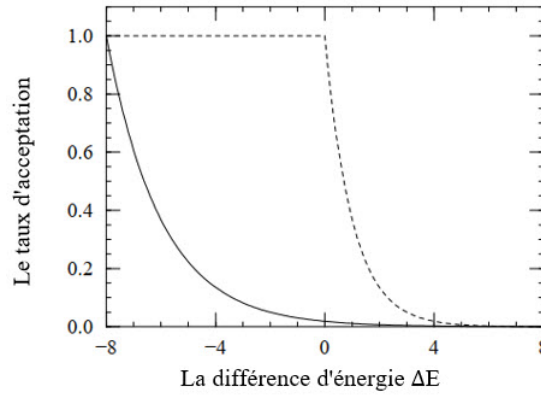


Figure II.1 – Courbe du rapport d'acceptation donné par l'équation (II.29) (ligne continue). Ce taux d'acceptation donne lieu à un algorithme qui échantillonne correctement la distribution de Boltzmann, mais qui est très inefficace, puisqu'il rejette la grande majorité des coups qu'il sélectionne pour considération. Le taux d'acceptation de Metropolis (ligne pointillée) est beaucoup plus efficace [156].

Il ne s'agit pas de l'algorithme de Metropolis, mais en utilisant cette probabilité d'acceptation, nous pouvons effectuer une simulation de Monte Carlo du modèle d'Ising, qui échantillonnera correctement la distribution de Boltzmann. Cependant, la simulation sera très inefficace, car le taux d'acceptation donné par l'équation (II.29) est très faible pour presque tous les coups. La figure II.1 montre le taux d'acceptation (ligne continue) en fonction de la différence d'énergie $\Delta E = E_b - E_a$ sur la plage de valeurs autorisée pour une simulation avec $\beta = J = 1$ et un nombre de coordination du réseau $z = 4$, comme sur un réseau carré par exemple. Comme nous pouvons le voir, bien que $R(a \rightarrow b)$ commence à 1 pour $\Delta E = -8$, il tombe rapidement à seulement 0,13 environ pour $\Delta E = -4$, et à seulement 0,02 lorsque $\Delta E = 0$. Les chances de réaliser un coup pour lequel $\Delta E > 0$ sont pitoyablement faibles, et en pratique cela signifie

qu'un algorithme utilisant ce taux d'acceptation serait extrêmement lent, passant la plupart de son temps à rejeter des coups et à ne pas retourner toutes les spins. La solution à ce problème est la suivante [156].

Dans l'équation (II.27), nous avons supposé une forme fonctionnelle spécifique pour le taux d'acceptation, mais la condition d'équilibre détaillé donné par l'équation (II.29), n'exige pas réellement qu'il prenne cette forme. L'équation (II.29) spécifie seulement le rapport des paires de probabilités d'acceptation, ce qui nous laisse encore une grande marge de manoeuvre. En fait, lorsqu'on est confronté à une contrainte comme (II.29), la façon de maximiser les rapports d'acceptation (et donc de produire l'algorithme le plus efficace) est toujours de donner au plus grand des deux rapports la plus grande valeur possible, à savoir 1, puis d'ajuster l'autre pour satisfaire la contrainte. Pour voir comment cela fonctionne dans ce cas, supposons que des deux états a et b que nous considérons ici, a a la plus faible énergie et b la plus élevée : $E_a < E_b$. Alors le plus grand des deux rapports d'acceptation est $R(a \rightarrow b)$, nous le fixons donc à un. Afin de satisfaire l'équation (II.29), $R(a \rightarrow b)$ doit alors prendre la valeur $e^{-\beta(E_b - E_a)}$. Ainsi, l'algorithme optimal est celui dans lequel :

$$R(a \rightarrow b) = \begin{cases} e^{-\beta(E_b - E_a)} & \text{si } E_b - E_a > 0, \\ 1 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{II.33})$$

4.1.1 Implémentation de l'algorithme de Metropolis

L'algorithme de Metropolis permet de déterminer la probabilité de transition la plus appropriée [156]. L'implémentation de l'algorithme de Metropolis suit les étapes suivantes :

1. A partir d'une configuration initiale a d'énergie E_a , une nouvelle configuration est créée de manière aléatoire.
2. Chaque nouvelle configuration est testée pour savoir si elle doit être rejetée ou acceptée, afin d'obtenir la nouvelle configuration b d'énergie E_b (à retenir).
3. Une fois les déplacements aléatoires effectués, on calcule la variation d'énergie $\Delta E = E_b - E_a$. Si $\Delta E < 0$, la nouvelle configuration b est acceptée. Si $\Delta E > 0$, on génère un nombre aléatoirement r entre 0 et 1. Si $r < e^{-\beta\Delta E}$, la nouvelle configuration est acceptée, sinon la nouvelle configuration est rejetée et le processus est répété jusqu'à l'obtention de b . Cette procédure est représentée dans la figure II.2.
4. Pour voir l'équilibre, nous suivons une quantité physique, comme l'aimantation magnétique ou l'énergie interne du matériau. Elle se stabilise après avoir atteint l'équilibre,

seules les fluctuations subsistent. Parfois, le système reste piégé dans un minimum local d'énergie. Pour l'éviter, nous partons de différentes configurations initiales.

Dans le cas du modèle d'Ising, l'état b est généré à partir de l'état a . en choisissant au hasard dans le réseau, un seul spin k à retourner (le flip). Les deux états diffèrent donc par l'inversion du spin k . La différence d'énergie, $\Delta E = E_b - E_a$, en l'absence du champ magnétique extérieur est calculée à partir de l'expression du hamiltonien donnée par l'équation :

$$\Delta E = E_b - E_a = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^b S_j^b + J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^a S_j^a = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^a (S_k^b - S_k^a) \quad (\text{II.34})$$

Si $S_k^a = 1$ alors $S_k^b = -1$ et $S_k^b - S_k^a = -2$,

Si $S_k^a = -1$ alors $S_k^b = 1$ et $S_k^b - S_k^a = 0$.

Alors

$$S_k^b - S_k^a = -2S_k^a \quad (\text{II.35})$$

Et

$$E_b - E_a = 2J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^a S_k^a = 2J S_k^a \sum_i S_i^a \quad (\text{II.36})$$

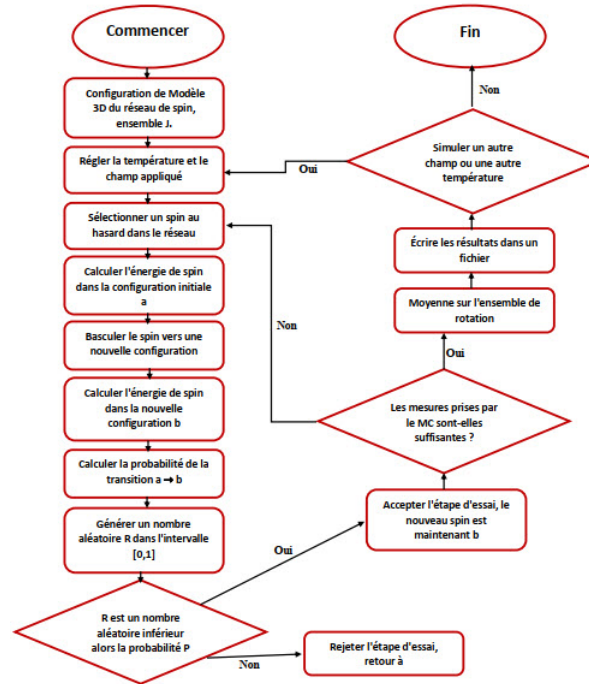


Figure II.2 – Diagramme de flux d'une simulation de Monte-Carlo avec l'algorithme de Metropolis [158]

4.1.2 Mesures et erreurs

Une fois que le système a atteint l'équilibre, les quantités les plus intéressantes peuvent être mesurées. Le programme de simulation doit tourner pendant un temps suffisamment long pour atteindre cet équilibre, comme nous l'avons déjà précisé dans la condition ergodique. Ce temps correspond aux étapes ou pas de Monte Carlo (Monte Carlo steps, en anglais). L'équilibre peut être identifié en suivant l'évolution d'une grandeur comme l'aimantation ou l'entropie (L'entropie est maximale à l'équilibre). Pour le modèle d'Ising, l'algorithme de Metropolis est utilisé pour calculer les grandeurs thermodynamiques et magnétiques telles que, l'aimantation totale, la susceptibilité totale ou la chaleur spécifique, en faisant converger le système de proche en proche vers une situation d'équilibre.

— L'aimantation totale de l'état a est donnée par :

$$M_a = \sum_i S_i^a \quad (\text{II.37})$$

Nous utilisons, la différence de l'aimantation :

$$\Delta M = M_b - M_a = \sum_i S_i^b - S_i^a = S_k^b - S_k^a = 2S_k^a \quad (\text{II.38})$$

d'où:

$$M_b = \Delta M + M_a = M_a + 2S_k^a \quad (\text{II.39})$$

— La susceptibilité magnétique :

$$\chi = \frac{N}{\beta} = (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (\text{II.40})$$

Où, N est le nombre total de spins correspondant à la taille du réseau.

— La chaleur spécifique :

$$C_v = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (\text{II.41})$$

Deux types d'erreurs existent : les erreurs statistiques et celles systématiques.

— Erreur statistique : C'est l'erreur sur la moyenne. Dans le modèle d'Ising, elle résulte des fluctuations thermiques. Pour obtenir des résultats fiables, il faut faire une moyenne sur des pas beaucoup plus grands que le nombre sur lequel les états de Monte Carlo sont corrélés. Cela devient plus difficile près du point critique en raison d'un ralentissement critique. Si l'on suppose que les aimantations M_i sont indépendantes, la meilleure

estimation de l'erreur statistique est donnée par :

$$\sigma = \sqrt{\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n (M_i - \overline{M})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{1}{1-n} (\overline{M^2} - (\overline{M})^2)} \quad (\text{II.42})$$

L'expression exacte de σ s'écrit :

$$\sigma = \sqrt{\frac{1 + \frac{2\tau}{\Delta t}}{1-n} * (\overline{M^2} - (\overline{M})^2)} \quad (\text{II.43})$$

Où Δt est la durée entre deux mesures et τ est le temps de corrélation (temps nécessaire au système pour passer d'un état à un autre, très différent du premier). Si $\Delta t \gg \tau$, on retrouve l'équation précédente.

Souvent $\Delta t \ll \tau$, où :

$$\sigma = \sqrt{\frac{2\tau}{t_{max}} * (\overline{M^2} - (\overline{M})^2)} \quad (\text{II.44})$$

Avec $n = \frac{t_{max}}{\Delta t \cdot \sigma}$ ne dépend pas de Δt , il y a donc liberté de choix.

— Erreurs systématiques : Les sources d'erreurs systématiques dans la simulation du modèle d'Ising sont le fait de :

1. N'attendez l'équilibre que pendant une courte période.
2. Ne pas faire fonctionner le système assez longtemps après l'équilibration.

Aucune méthode générale pour estimer ces erreurs n'existe..

En plus de l'algorithme de Metropolis, il y'a deux autres algorithmes de retournement d'un seul spin par étape, qui sont également largement utilisés de nos jours. Il s'agit des algorithmes "du bain thermique" et "glauber" [159]. Ces algorithmes sont parfois appelés algorithmes de mise à jour : Dans le modèle de Potts (dont la simulation de Monte Carlo est similaire à celle d'Ising), à basse température, l'algorithme de Metropolis n'est plus efficace. Pour surmonter cette difficulté, nous utilisons l'algorithme du bain chaud.

Notes : Lors de l'implémentation de l'algorithme de Metropolis, la connaissance d'un certain nombre de détails pratiques est un atout pour obtenir un code qui fonctionne correctement :

- Configuration initiale : Elle ne doit pas influencer la configuration finale. Cependant, l'équilibre peut être atteint plus rapidement si une bonne configuration initiale est choisie.

- Degrés de liberté : Il existe plusieurs façons de mettre à jour les degrés de liberté dans le programme. Ils peuvent être choisis au hasard ou selon une permutation aléatoire, qui peut être mise à jour. Cependant, un ordre séquentiel simple fixé est également autorisé. Dans les modèles de réseau, on peut aussi mettre à jour d'abord les sites pairs, puis tous les sites impairs, ce qui est le choix habituel dans les codes vectorisés.
- Conditions aux limites : Différentes conditions aux limites peuvent être utilisées :
 1. Conditions limites périodiques : Le système est répété périodiquement dans toutes les directions pour imiter un système infini.
 2. Conditions aux limites libres : Elles sont utilisées pour décrire les systèmes finis comme les nanoparticules. Les systèmes semi-finis peuvent être décrits par des conditions aux limites telles que la surface, le système multicouche, le nanofil et le nanotube.
- Les nombres aléatoires : Ils sont générés par des générateurs de nombre pseudo-aléatoire, qui peuvent produire des nombres uniformément distribués dont les valeurs sont très difficiles, voire impossibles à prédire à l'aide d'une règle déterministe quelconque. La qualité d'un nombre pseudo-aléatoire se mesure à la difficulté de dériver la règle déterministe qui sous-tend leur génération, à l'absence de corrélations et à un temps très long. Il est très important pour un nombre pseudo-aléatoire de produire des résultats reproductibles à des fins de test et également portables entre différentes plateformes informatiques.
- Les effets de la taille du réseau : Effets de taille finie. Les réseaux considérés dans les simulations de Monte Carlo, en tant qu'outils numériques limités par la mémoire de l'ordinateur, doivent avoir une taille finie alors que les propriétés macroscopiques sont généralement visées. Pour porter la limite d'une taille à l'infini, on calcule, le plus souvent, une moyenne pour plusieurs tailles différentes du réseau, puis on extrapole la moyenne à une taille infinie.

Pour les matériaux réels, il faut noter qu'une étude primaire consistant à déterminer les constantes d'interaction d'échange, l'anisotropie magnétique ou tout autre paramètre du système contenu dans le hamiltonien, est souvent réalisée expérimentalement ou théoriquement. Cependant, pour les nanomatériaux en général, ces paramètres ne sont pas toujours déterminés exactement, que ce soit expérimentalement ou théoriquement. Ceci s'explique par le fait que les phénomènes à l'origine du magnétisme dans ces matériaux sont complexes et ne permettent pas d'intégrer les interactions d'échanges entre les spins d'Ising, qui sont fixés sur les différents sites du réseau représentant le système étudié.

4.2 Algorithme de Wolff

L'algorithme traditionnel de Metropolis, lorsqu'il est appliqué aux modèles d'Ising proches de leurs points critiques, souffre de graves problèmes de ralentissement critique. Ceci est dû à sa procédure de mise à jour à site unique, qui est bonne pour mettre à jour les composantes à courte longueur de corrélation des configurations, mais très mauvaise pour mettre à jour les composantes à grande longueur de corrélation. Près du point critique T_c , les composantes de grande longueur de corrélation jouent un rôle important en raison de l'émergence de corrélations à longue distance, et dans ces circonstances, l'algorithme a tendance à ne se diffuser que très lentement dans l'espace de configuration du modèle. Ceci augmente les autocorrélations le long de la séquence stochastique des configurations et dégrade sévèrement la qualité statistique des résultats.

Alors, lorsque la longueur de corrélation devient importante à proximité de T_c , de grandes régions se forment dans lesquelles tous les spins pointent dans la même direction. Ces régions sont souvent appelées domaines. Il est assez difficile pour l'algorithme de retourner l'un de ces grands domaines car il doit le faire spin par spin, et chaque mouvement a une probabilité assez élevée d'être rejeté en raison des interactions ferromagnétiques entre les spins voisins. Les chances de renverser un spin au milieu d'un domaine sont particulièrement faibles, car il est entouré de quatre autres spins pointant dans la même direction. En deux dimensions, le retournement d'un tel spin nous coûte $8J$ en énergie et, en employant la valeur de $T_c \simeq 2,269J$, la probabilité d'accepter un tel mouvement, lorsque nous sommes proches de la température critique est de :

$$R(a \rightarrow b) \simeq e^{-8J/T_c} = 0.0294... \quad (\text{II.45})$$

Soit environ trois pour cent, quelle que soit la valeur de J . La probabilité de retourner un spin sur le bord d'un domaine est plus élevée car le coût énergétique est plus faible, et il s'avère en fait que ce processus est le plus essentiel quand il s'agit de retourner des domaines entiers. En fait, il s'avère que ce processus est dominant lorsqu'il s'agit de retourner des domaines entiers. Les grands domaines qui se forment à proximité de la température critique.

Une solution à ces problèmes a été proposée en 1989 par Ulli Wolff [160], sur la base des travaux antérieurs de Swendsen et Wang (1987) [161]. L'algorithme qu'il a proposé est maintenant connu sous le nom d'algorithme de Wolff. L'idée de base est de rechercher des groupes de spins orientés de manière similaire, puis de les retourner dans leur intégralité en une seule fois, plutôt que d'essayer de les retourner spin par spin douloureux. Les algorithmes de ce type sont appelés algorithmes de retournement d'amas, ou parfois simplement algorithmes d'amas, et ces dernières années, ils sont devenus populaires pour toutes sortes de problèmes,

car il s'avère que, au moins dans le cas du modèle d'Ising, ils suppriment presque entièrement le problème du ralentissement critique.

Comment faire alors pour trouver ces groupes de spins que l'on va retourner ? La stratégie la plus simple qui s'impose, et celle qu'utilise l'algorithme de Wolff, est de prendre un spin au hasard dans le réseau et de regarder ses voisins pour voir si l'un d'eux pointe dans la même direction.

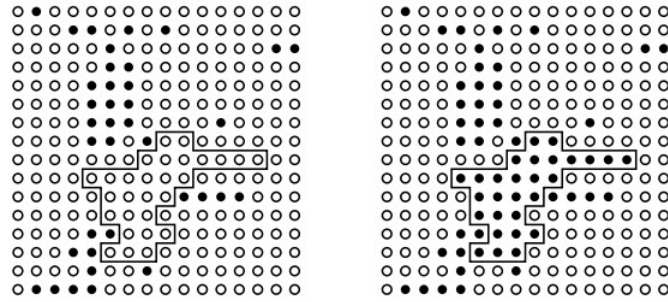


Figure II.3 – Retournement d'amas dans une simulation du modèle d'Ising 2D. Les cercles pleins et ouverts représentent les spins ascendants et descendants dans le modèle [156].

Ensuite, nous pouvons examiner les voisins de ces voisins, et ainsi de suite, de manière itérative, jusqu'à ce que nous ayons construit un groupe entier de spins. Il est clair, cependant, que nous ne voulons pas simplement retourner tous les spins qui pointent dans la même direction que notre premier spin "graine". Le nombre de spins à retourner dépend de la température. Nous savons par exemple qu'à haute température, dans le modèle d'Ising, les spins ont tendance à ne pas être corrélés avec leurs voisins, ce qui implique qu'ils se retournent seuls ou en très petits groupes.

À mesure que nous approchons de T_c , nous savons que la taille des amas devient beaucoup plus grande, puis, lorsque nous passons en dessous de T_c , le ferromagnétisme s'installe et la plupart des spins s'alignent dans la même direction, formant un grand amas qui s'étend sur tout le réseau. En d'autres termes, la taille des amas que nous retournons devrait augmenter avec la diminution de la température. Nous pouvons y parvenir si nous construisons nos amas à partir d'une graine, comme décrit ci-dessus, mais nous n'ajoutons pas à l'amas tous les voisins du spin de la graine qui ont une orientation similaire. Au lieu de cela, nous avons une certaine probabilité P_{add} d'ajouter un spin, qui augmente à mesure que la température diminue. Ensuite, nous examinons les voisins des spins que nous avons ajoutés à l'amas, et nous les ajoutons avec la probabilité P_{add} , et ainsi de suite. Enfin, lorsqu'il n'y a plus de spins orientés de manière similaire à ajouter à l'amas, on arrête et on retourne l'amas avec un certain taux d'acceptation qui dépend du coût énergétique du retournement. Alors une question se pose: étant donné un

choix particulier de P_{add} , quel est le taux d'acceptation correct pour que l'algorithme satisfasse l'équilibre détaillé, et quel est le meilleur choix de P_{add} pour que le taux d'acceptation moyen soit aussi proche de 1 que possible ?

Considérons deux états du système a et b , illustrés à la figure II.3. Ils diffèrent l'un de l'autre par le basculement d'un seul groupe de spins orientés de manière similaire. L'élément crucial à noter est la façon dont les spins sont orientés autour du bord de l'amas (qui est indiqué par la ligne dans la figure). Remarquez que dans chacun des deux états, certains des spins situés juste à l'extérieur de l'amas pointent dans la même direction que les spins de l'amas. Les liaisons entre ces spins et ceux de l'amas doivent être "brisées" lorsque l'amas est retourné. Inévitablement, Les liaisons qui ne sont pas brisées lors du passage de a à b doivent l'être si nous retournons de b à a .

La probabilité de choisir la graine est exactement la même dans les deux directions, tout comme la probabilité d'ajouter chaque spin à l'amas. La seule chose qui change entre les deux est la probabilité de "briser" les liaisons autour du bord de l'amas, car les liaisons qui doivent être brisées sont différents dans les deux cas. Supposons que pour le mouvement vers l'avant, m liaisons doivent être brisées afin de retourner l'amas. Ces liaisons brisées représentent des paires de spins orientés de manière similaire qui n'ont pas été ajoutés à l'amas par l'algorithme. La probabilité de ne pas ajouter un tel spin est de $1 - P_{add}$. Ainsi, la probabilité de ne pas les ajouter toutes, qui est proportionnelle à la probabilité de sélection $\pi(a \rightarrow b)$ pour le déplacement vers l'avant, est $(1 - P_{add})^m$. S'il y a n liaisons qui doivent être brisées dans le coup inverse, alors la probabilité de le faire sera $(1 - P_{add})^n$. La condition de la balance détaillée, nous dit alors que :

$$\frac{\pi(a \rightarrow b) * R(a \rightarrow b)}{\pi(b \rightarrow a) * R(b \rightarrow a)} = (1 - P_{add})^{m-n} \frac{R(a \rightarrow b)}{R(b \rightarrow a)} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{II.46})$$

Où $R(a \rightarrow b)$ et $R(b \rightarrow a)$ sont les taux d'acceptation pour les mouvements dans les deux directions. La variation de l'énergie $E_b - E_a$ entre les deux états dépend également des liaisons qui sont brisées. Pour chacune des m liaisons qui sont brisées lors du passage de a à b , l'énergie change de $+2J$. Pour chacune des n liaisons qui sont créées, l'énergie change de $-2J$. Ainsi,

$$E_b - E_a = 2J(m - n) \quad (\text{II.47})$$

En substituant dans l'équation (II.46) et en réarrangeant, nous obtenons la condition suivante sur les taux d'acceptation :

$$\frac{R(a \rightarrow b)}{R(b \rightarrow a)} = [e^{2\beta J}(1 - P_{add})]^{n-m} \quad (\text{II.48})$$

Mais nous remarquons maintenant un fait réjouissant. Si nous choisissons :

$$P_{add} = 1 - e^{-2\beta J} \quad (\text{II.49})$$

Alors le côté droit de l'équation (II.48) est juste 1, indépendamment de toute propriété des états a et b , ou de la température, ou de toute autre chose. Avec ce choix, nous pouvons faire en sorte que les taux d'acceptation des mouvements en avant et en arrière soient égaux à 1, ce qui est la meilleure valeur qu'ils puissent prendre. Chaque mouvement que nous proposons est accepté et l'algorithme satisfait toujours à la balance détaillée. Le choix (II.49) définit l'algorithme d'amas de Wolff pour le modèle d'Ising, dont l'énoncé précis est le suivant :

1. Choisissez un spin de départ au hasard sur le réseau.
2. Visitez les sites voisins du site choisi. S'ils pointent dans la même direction que le spin de départ, ajoutez-les à l'amas avec la probabilité $P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$.
3. Pour chaque spin ajouté lors de la dernière étape, examinez chacun de ses voisins pour trouver ceux qui pointent dans la même direction et ajoutez chacun d'entre eux à l'amas avec la même probabilité P_{add} . (Remarquez qu'au fur et à mesure que l'amas s'agrandit, il se peut que certains des voisins soient déjà membres, auquel cas il n'est pas nécessaire de les ajouter à nouveau. De même, certains des spins peuvent avoir été considérés comme des voisins d'autres spins de l'amas, mais rejetés. Dans ce cas, ils ont une autre chance d'être ajoutés à l'amas lors de cette étape). Cette étape est répétée autant de fois que nécessaire jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de spins dans l'amas dont les voisins n'ont pas été considérés pour l'inclusion dans l'amas.
4. Retournez l'amas.

4.3 Algorithme de Swendsen-Wang

Après les algorithmes de Metropolis et de Wolff, l'autre algorithme le plus important est probablement celui de Swendsen et Wang en 1987 [161], comme l'algorithme de Wolff [160], est un algorithme de retournement d'amas. En fait, cet algorithme est presque identique à celui de Wolff et en a directement repris l'idée pour son algorithme. (Swendsen et Wang ont à leur tour repris l'idée des travaux de Fortuin et Kasteleyn (1972) [162] et de Coniglio et Klein (1980) [163]). En fait, nous avons considéré une implémentation alternative de l'algorithme de Wolff dans laquelle le réseau entier de spins est divisé en amas en créant des "liaisons" avec une probabilité $P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$ entre des spins voisins orientés de manière similaire; tout groupe de spins qui est connecté ensemble par des liaisons est une amas. On imagine alors de choisir

un seul spin dans le réseau et de retourner l'ensemble de l'amas auquel il appartient. Cette procédure est clairement équivalente à l'algorithme de Wolff, bien qu'en pratique, ce serait une façon très inefficace de la réaliser.

L'algorithme de Swendsen-Wang divise l'ensemble du réseau en amas exactement de la même manière, avec cette même probabilité P_{add} d'établir une liaison. Mais ensuite, au lieu de basculer un seul amas, tous les amas sont basculés avec une probabilité de $\frac{1}{2}$. Autrement dit, pour chaque amas, nous décidons indépendamment, avec une probabilité de $\frac{1}{2}$, de le retourner ou non. Nous remarquons les faits suivants sur cet algorithme :

1. L'algorithme satisfait l'exigence d'ergodicité. Pour s'en convaincre, notons qu'il y a toujours une chance finie qu'aucune liaison ne soit établi sur le réseau (en fait, c'est ce qui se produit généralement lorsque T devient très grand), auquel cas la randomisation subséquente des amas équivaut simplement à choisir un nouvel état au hasard pour le réseau entier. Ainsi, il est en théorie possible de passer de n'importe quel état à n'importe quel autre en une seule étape.
2. L'algorithme satisfait également à la condition de la balance détaillée. La preuve de ce fait est exactement la même que pour l'algorithme de Wolff. Si les nombres de liaisons brisées et créés lors d'un déplacement sont respectivement m et n (et l'inverse pour le déplacement inverse), alors la variation d'énergie pour le déplacement est de $2J(m - n)$ (ou $2J(n - m)$ pour le déplacement inverse). Les probabilités de sélection pour le choix d'un ensemble particulier de liens ne diffèrent entre les mouvements vers l'avant et vers l'arrière qu'aux endroits où les liaisons sont établies ou brisées, de sorte que le rapport des deux probabilités de sélection est $(1 - P_{add})^{m-n}$, tout comme auparavant. En choisissant $P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$, nous nous assurons alors, tout comme précédemment, que la probabilité d'acceptation est indépendante de m et n et de tout le reste, donc tout choix qui la rend identique dans chaque direction, comme retourner tous les amas avec la probabilité $\frac{1}{2}$, rendra l'algorithme correct. Notez cependant que de nombreux autres choix fonctionneraient également. La façon dont nous choisissons de retourner les amas n'a pas d'importance, bien que le choix fait ici soit bon car il minimise la corrélation entre la direction d'un amas avant et après un déplacement, la nouvelle direction étant choisie complètement au hasard, sans tenir compte de l'ancienne.
3. L'algorithme met à jour l'ensemble du réseau à chaque déplacement. En mesurant les temps de corrélation pour cet algorithme, on devrait donc les mesurer simplement en nombre d'étapes de Monte Carlo, et non en étapes par site comme avec l'algorithme de Metropolis. (En fait, en moyenne, seule la moitié des spins est retournée à chaque

déplacement, mais le nombre de spins retournés évolue comme la taille du système, ce qui est le point important).

4. L'algorithme de Swendsen-Wang est essentiellement le même que l'algorithme de Wolff pour les basses températures. Bien en dessous de T_c , un des amas choisis par l'algorithme sera le grand amas percolant, et le reste correspondra aux "excitations", qui seront très petites. Si l'on ne tient pas compte de ces très petits amas, l'algorithme de Swendsen-Wang aura tendance à retourner l'épine dorsale percolante du réseau en moyenne tous les deux pas (plutôt que tous les pas comme dans l'algorithme de Wolff), mais pour le reste, les deux algorithmes se comporteront de manière presque identique. Ainsi, comme pour l'algorithme de Wolff, on peut s'attendre à ce que les performances de l'algorithme de Swendsen-Wang soient similaires à celles de l'algorithme de Metropolis pour les faibles valeurs de T , bien que probablement un peu plus lentes en moyenne en raison de la complexité de l'algorithme.
5. à haute température, l'algorithme de Swendsen-Wang a tendance à diviser le réseau en très petits amas car P_{add} devient petit. Comme $T \rightarrow \infty$ les amas ne seront qu'un spin chacun, et l'algorithme se contentera de changer tous les spins à de nouvelles valeurs aléatoires à chaque déplacement. C'est également ce que fait l'algorithme de Metropolis à haute température en un seul balayage du réseau, bien que l'on puisse s'attendre à ce que l'algorithme de Metropolis soit un peu plus efficace dans ce régime, puisqu'il s'agit d'un algorithme plus simple qui nécessite peu d'opérations sur l'ordinateur pour retourner chaque spin.

4.4 Algorithme de Niedermayer

Une autre variation sur le thème général de l'algorithme de l'amas a été proposée par Ferenc Niedermayer en 1988 [164]. Sa suggestion n'est en fait qu'une extension des idées utilisées dans les algorithmes de Wolff [160] et de Swendsen-Wang [161]. Les méthodes de Niedermayer sont très générales et peuvent être appliquées à toutes sortes de modèles, tels que les modèles de verre de spin. Nous nous contenterons ici de considérer leur application au modèle d'Ising ordinaire.

Niedermayer a fait remarquer qu'il n'est pas nécessaire de contraindre les "liaisons" avec lesquels nous créons des amas à être uniquement entre des spins qui pointent dans la même direction. En général, nous pouvons définir deux probabilités différentes pour établir des liaisons entre les sites: une pour les spins parallèles et une pour les spins antiparallèles. De la manière dont Niedermayer l'a exprimé, il a considéré la contribution énergétique E_{ij} qu'une paire de

spins i et j apporte au hamiltonien. Dans le cas du modèle d'Ising, par exemple :

$$E_{ij} = -Js_i s_j \quad (\text{II.50})$$

Il a ensuite écrit la probabilité d'établir une liaison entre deux spins voisins en fonction de cette énergie $P_{add}(E_{ij})$. Dans le modèle d'Ising, E_{ij} ne peut prendre que deux valeurs $\pm J$, donc la fonction $P_{add}(E_{ij})$ ne doit être définie qu'en ces points, mais pour certains des modèles plus généraux que Niedermayer a considérés, elle doit être définie ailleurs aussi. Il est clair que si, pour le modèle d'Ising, nous faisons en sorte que $P_{add}(-J) = 1 - e^{-2\beta J}$ et $P_{add}(J) = 0$, alors nous récupérerons l'algorithme de Wolff ou l'algorithme de Swendsen-Wang, selon que nous ne retournons qu'un seul amas à chaque déplacement, ou de nombreux amas sur l'ensemble du réseau, le formalisme de Niedermayer est applicable dans les deux cas.

Pour être concret, regardons le cas de l'algorithme de Niedermayer à un seul amas (le type de Wolff). Tout d'abord, il est clair que pour tout choix de P_{add} (sauf le choix très stupide $P_{add}(E) = 1$ pour tout E), l'algorithme satisfait la condition d'ergodicité. Tout comme dans l'algorithme de Wolff, il y a une probabilité finie que n'importe quel spin sur le réseau se retrouve le seul membre d'un amas de un. En inversant une succession de tels amas, nous passerons clairement de n'importe quel état à n'importe quel autre en un nombre fini de mouvements. Deuxièmement, appliquons la condition de la balance détaillé à l'algorithme. Considérons, comme nous l'avons fait dans le cas de l'algorithme de Wolff, deux états de notre système qui diffèrent par le basculement d'une seul amas. (Vous pouvez regarder à nouveau la figure 26, mais gardez à l'esprit que, puisque nous autorisons maintenant des liens entre des spins antiparallèles, il n'est pas nécessaire que tous les spins de l'amas pointent dans la même direction). Comme précédemment, la probabilité de former l'amas lui-même est exactement la même dans les directions avant et arrière, à l'exception des contributions provenant des frontières. Aux frontières, il y a quelques paires de spins qui sont parallèles et d'autres qui sont antiparallèles. Supposons que dans la direction avant, il y ait m paires de spins parallèles aux frontières - des liaisons qui seront brisées en retournant l'amas et n paires qui sont des liaisons antiparallèles qui seront faites. Par définition, aucune liaison n'est établie entre les spins de l'une de ces paires de frontières, et la probabilité que cela se produise est $[1 - P_{add}(-J)]^m [1 - P_{add}(J)]^n$. Dans le sens inverse, la probabilité correspondante est $[1 - P_{add}(-J)]^n [1 - P_{add}(J)]^m$. Comme dans le cas de Wolff, le coût énergétique du passage de l'amas de l'état a à l'état b est de :

$$E_b - E_a = 2J(m - n) \quad (\text{II.51})$$

Ainsi, la généralisation appropriée de la relation du taux d'acceptation tel que équation

(II.48), est la suivante:

$$\frac{R(a \rightarrow b)}{R(b \rightarrow a)} = \left[e^{2\beta J} \frac{1 - P_{add}(-J)}{1 - P_{add}(J)} \right]^{n-m} \quad (\text{II.52})$$

Tout choix de taux d'acceptation $R(a \rightarrow b)$ et $R(b \rightarrow a)$ qui satisfait cette relation satisfera la balance détaillé. Pour le choix Wolff de P_{add} , nous obtenons des taux d'acceptation qui sont toujours égal à 1, mais Niedermayer a fait remarquer qu'il existe d'autres moyens d'y parvenir. En fait, il suffit de choisir P_{add} pour satisfaire :

$$\frac{1 - P_{add}(-E)}{1 - P_{add}(E)} = e^{-2\beta J} \quad (\text{II.53})$$

La solution de Niedermayer à cette équation était $P_{add}(E) = 1 - e^{\beta(E-E_0)}$ où E_0 est un paramètre arbitraire dont nous pouvons choisir la valeur comme nous le voulons. Notez cependant que $P_{add}(E)$ est positive. Ainsi, la meilleure expression que nous pouvons écrire pour la probabilité $P_{add}(E_{ij})$ d'ajouter une liaison entre les sites i et j est :

$$P_{add}(E_{ij}) = \begin{cases} 1 - e^{-\beta(E_{ij}-E_0)} & \text{si } E_{ij} \leq E_0, \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{II.54})$$

Et ceci définit l'algorithme de Niedermayer. Remarquez les choses suivantes à propos de cet algorithme :

1. Tant que tous les $E_{ij} \leq E_0$, les deux taux d'acceptation peuvent être choisis comme étant égaux pour chaque mouvement. Puisque nous sommes libres de choisir E_0 comme nous le voulons, nous pouvons toujours satisfaire cette condition en le rendant supérieur ou égal à la plus grande valeur que E_{ij} peut prendre, qui est J dans le cas du modèle d'Ising. Cela nous donne tout un spectre d'algorithmes de type Wolff pour diverses valeurs $E_0 \geq J$, qui ont tous des taux d'acceptation égal à 1. L'algorithme de Wolff lui-même est équivalent à $E_0 = J$. Si nous augmentons E_0 au-dessus de cette valeur J , les probabilités $P_{add}(E_{ij})$ tendent de plus en plus vers 1, rendant les amas formés de plus en plus grands. Cela nous permet de contrôler la taille des amas formés par notre algorithme, jusqu'à des amas qui englobent (presque) tous les spins du réseau à chaque mouvement.
2. Si nous choisissons que E_0 est inférieur à la plus grande valeur possible de E_{ij} , alors le côté droit de l'équation (II.54) n'est plus égal à 1, et nous ne pouvons plus choisir les taux d'acceptation égal à 1. Pour le modèle d'Ising, si nous choisissons $-J \leq E_0 < J$

alors nous avons :

$$\frac{R(a \rightarrow b)}{R(b \rightarrow a)} = \left[e^{2\beta J} e^{-\beta(J+E_0)} \right]^{n-m} = \left[e^{\beta(J-E_0)} \right]^{n-m} \quad (\text{II.55})$$

Tout comme avec l'algorithme de Metropolis, le choix optimal de taux d'acceptation est alors de rendre le plus grand des deux égal à 1, et de choisir le plus petit pour satisfaire cette équation. Si nous faisons cela, nous obtenons à nouveau balance détaillée, et nous avons maintenant un algorithme qui, au fur et à mesure que E_0 devient de plus en plus petit, produit des amas de plus en plus petits, bien qu'il le fasse au prix d'un taux d'acceptation exponentiellement décroissant pour les mouvements de amas qui augmentent l'énergie du système.

3. Si E_0 est choisi pour être plus petit que la plus petite valeur possible de E_{ij} , qui est $-J$, alors $P_{add}(E_{ij}) = 0$ pour toutes les paires de spins i et j , donc chaque amas formé ne contient qu'un seul spin et les taux d'acceptation sont donnés par :

$$\frac{R(a \rightarrow b)}{R(b \rightarrow a)} = \left[e^{2\beta J} \right]^{n-m} \quad (\text{II.56})$$

En gardant à l'esprit que m est le nombre de voisins de ce spin unique qui pointent dans la même direction que lui, et n est le nombre de ceux qui pointent dans la direction opposée, nous pouvons voir que c'est exactement la même chose que l'équation (II.30) qui définit l'algorithme de Metropolis.

Chapitre III

Étude des propriétés magnétiques dans les nanofils hexagonaux à spins mixtes et à deux couches alternées

Introduction

Dernièrement, les matériaux magnétiques à structure nanométrique tels que les nanofils, les nanotubes les nanoparticules et les nanofilms ont attiré la grande attention de la communauté scientifique de point de vue théorique et expérimentale. Leurs fortes interactions d'atomes (grand rapport de surface/volume) ainsi que leurs basses dimensionnalités leur permettent d'offrir de nouvelles propriétés physiques et chimiques par rapport aux matériaux classiques.

En effet, le nombre d'études théoriques, axées particulièrement sur les nanofils magnétiques et leurs applications, a augmenté ces dernières années en utilisant de nombreux modèles théoriques, tels que le modèle d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes et à structure hexagonale en présence du champ cristallin longitudinal [109, 113, 165]. La richesse de ce modèle en phénomènes critiques et multicritiques est dû au fait qu'il tient en considération deux éléments physiques importants: l'anisotropie cristalline et les interactions d'échange intra et intercouches [17]. Les résultats significatifs enregistrés ont été améliorés par l'utilisation de diverses méthodes et techniques théoriques et numériques telles que la théorie du champ effectif (EFT) avec corrélations [166–168], l'approximation du champ moyen (MFA) [169, 170] et la simulation de Monte-Carlo (MC) [171, 172].

A l'aide des calculs de Monte-Carlo, un certain nombre de résultats caractéristiques est obtenu pour les nanofils ferrimagnétiques à spins mixtes tels que le comportement tricritique, le phénomène de compensation et le phénomène multiboucles des cycles d'hystérésis. Ces phénomènes sont d'une grande importance technologique notamment dans le processus d'écriture et d'effacement dans les dispositifs magnéto-optiques à haute densité [173]. Récemment, M. Gharaibeh et al [174] ont étudié les propriétés magnétiques et les diagrammes de phase d'un système d'Ising ferrimagnétique à spins $(1/2, 1)$ et à structure carrée en présence du champ cristallin longitudinale D_z . La température de compensation, les aimantations type-N, -P, -Q et les transitions de phase du second ordre ont été obtenus pour de petites valeurs de D_z . Des diagrammes de phase avec des points tricritiques ont été trouvés pour les systèmes ferrimagnétiques à spins $(1, 3/2)$ [175]. D'autre part, il a été montré que la courbe d'aimantation totale peut exhiber de nouveaux types d'aimantations tel que V et W qui n'ont pas été mentionné dans la théorie classique de Néel [116, 117].

De plus, des phénomènes à trois et à quatre boucles d'hystérésis ont été bien signalés dans le cas des systèmes nanoparticules ferrimagnétiques et antiferromagnétiques à structures cœur-coquille par L. B. Drissi et al [176] en utilisant la méthode de Monte Carlo. M. Keskin et M. Ertaş ont également examiné les propriétés magnétiques dynamiques d'un système nanofil hexagonal à spin-(2) et à structure cœur-coquille en utilisant la théorie dynamique du champ moyen basée sur la dynamique stochastique de type Glauber [177], ils ont trouvé que le phénomène de compensation ainsi que le phénomène multi-boucle des cycles d'hystérésis dépendent fortement de l'anisotropie cristalline longitudinale. Il est à noter que le phénomène d'hystérésis à trois boucles a été également élaboré pour les matériaux magnétiques à base moléculaire en utilisant la méthode de Monte-Carlo (MC) pour un système à spin-2 et 5/2 et à structure nid d'abeille [178]. Les comportements hystérétiques pour les nanostructures cœur-coquille ont été également étudiés en utilisant l'EFT avec corrélations [179]. Généralement, K. Htoutou et al [180] ont montré que les phénomènes d'hystérésis à trois ou multi-boucles apparaissent dans les systèmes multicouches notamment à basse température et pour des valeurs négatives du champ cristallin longitudinal. Ce phénomène dépend aussi des interactions d'échange intra et intercouches. Ce phénomène dépend aussi des interactions d'échange intra et intercouches. Ce qui a été aussi confirmé dans les systèmes nanofils à structure cœur-coquille par Y. Benhouria et al [181] en utilisant la méthode de Monte Carlo, par K. Htoutou et al [182] en utilisant la théorie du champ effectif (EFT) avec la loi de probabilité, et par Y. Kocakaplan et al [183] avec la même méthode. Cette propriété est très utile dans les dispositifs de mémoire multi-états [184]. Enfin, le comportement dynamique des nanostructures a été également étudié à l'aide de l'EFT avec [185] et de l'MFA [186].

Dans ce mémoire de thèse, nous avons choisi d'examiner tout d'abord sur les systèmes nanofils ferrimagnétiques hexagonaux à spins- $(1/2, 1)$, $(3/2, 5/2)$ et $(3/2, 2)$ et à deux couches alternées. Nous avons étudié les quantités thermodynamiques et magnétiques telles que l'aimantation totale, les aimantations partielles (de deux sous réseaux A et B), la susceptibilité totale, la chaleur spécifique, l'énergie interne et les diagrammes de phase. Nos résultats numériques sont obtenus en utilisant la simulation de Monte-Carlo (MCS) basée sur l'algorithme de Métropolis.

À notre connaissance, de telle études n'ont été jamais réalisées. Les cycles d'hystérésis ou la variation de l'aimantation en fonction du champ magnétique externe longitudinal h ont été également examinées. Il est bien connu que le champ magnétique longitudinal h est un paramètre physique important et qui a une grande influence sur les propriétés magnétiques. Son effet est similaire à celui de la température et de la pression dans les différentes méthodes de synthèse et d'assemblage des matériaux à structures hexagonales et d'autres comme les nanofils magnétiques $NiFe/Au$ à code-barres nanométriques [187], les nanofils multicouches $[FeCoCu(y)/Cu(x)]_{10}$ et $Fe_{30}Co_{64}Cu_6$ [188], les réseaux de nanofils $Fe_{48}Co_{52}$ et $NiCo$ [189], le composé intermétallique Fe_3Ge/Si [190], les nanofils $Fe_{1-x}S$ [191] et les nanofils ultrafins $Fe - Co$ et $Mn - Si$ [192].

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressé dans un premier temps à l'étude des diagrammes de phase, les propriétés magnétiques et les cycles d'hystérésis d'un nanofil d'Ising ferrimagnétique hexagonal à spins $(1/2, 1)$, composé de deux couches alternées [193]. Dans un deuxième temps, nous avons développé notre étude pour les systèmes nanofils ayant la même structure mais avec mélange de spins plus élevés, à savoir $(3/2, 5/2)$ [194] et $(3/2, 2)$ [195], et ce, dans la 2^{ème} et la 3^{ème} partie, respectivement.

1 Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1, 1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers (In Materials Research Express 4(11) (2017) 116108.)

1.1 Présentation du système étudié

Dans ce premier travail, nous considérons un nanofil hexagonal composé de deux couches alternées, A (à spins $\sigma = 1/2$) et B (à spins $S = 1$), comme il est illustré dans la figure III.1.

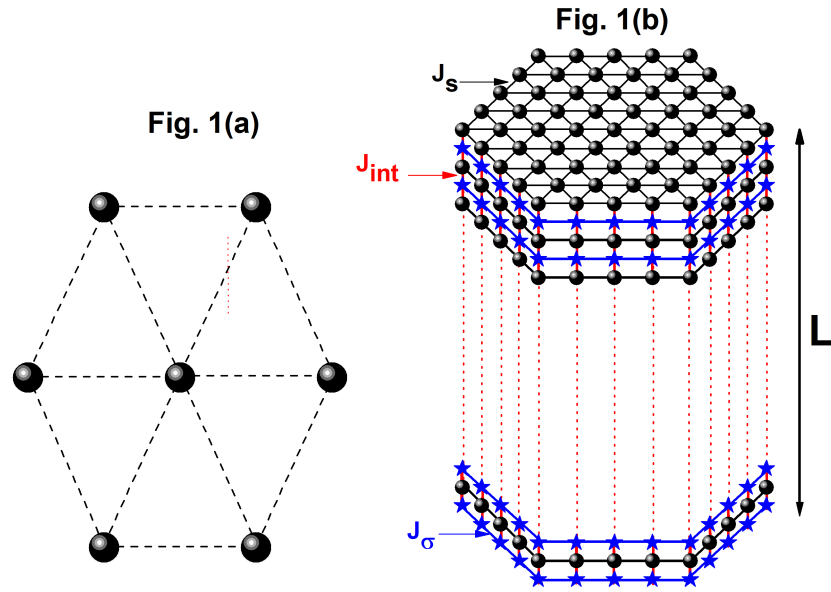


Figure III.1 – Nanofil hexagonal à deux couches alternées: couches à spins- $S = 1$ et couches à spins- $\sigma = 1/2$, (a) coupe transversale et (b) tridimensionnelle, [179].

L'Hamiltonien du système est donné par l'expression suivante :

$$\mathcal{H} = -J_s \sum_{\langle i,j \rangle} S_{iz} S_{jz} - J_\sigma \sum_{\langle n,m \rangle} \sigma_{nz} \sigma_{mz} - J_{int} \sum_{\langle i,n \rangle} S_{iz} \sigma_{nz} - D \sum_i (S_{iz})^2 - h \left(\sum_i S_{iz} + \sum_n \sigma_{nz} \right) \quad (\text{III.1})$$

III.1 Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1,1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers [\(In Materials Research Express 4\(11\) \(2017\) 116108.\)](#)

où $S_{iz} = \pm 1, 0$ et $\sigma_{nz} = \pm \frac{1}{2}$ désignent respectivement les composantes suivant (Oz) de l'opérateur de spin dans les sites i et n . Les trois premières sommations portent sur tous les spins proches voisins. J_s et J_σ désignent respectivement les interactions d'échange ferromagnétiques entre les proches voisins $S - S$ et $\sigma - \sigma$. J_{int} dénote l'interaction d'échange antiferromagnétique entre les spins proches voisins $\sigma - S$. D/J_s dénote l'anisotropie (champ cristallin longitudinal) agissant uniquement sur les spins $S = 1$ du sous-réseau B, il provoque aussi une anisotropie du système car S^2 prend deux valeurs 1 ou 0, ce qui n'est pas possible dans le cas des spins- $\sigma = \frac{1}{2}$ du sous-réseau A. Et h désigne le champ magnétique longitudinal externe. En utilisant la méthode de Monte-Carlo basée sur l'algorithme de Metropolis [20, 21], nous avons appliqué les conditions aux limites périodiques suivant la direction (Oz) qui est d'épaisseur finie L . Cependant, nous avons appliqué des conditions libres suivant les directions (Ox) et (Oy). Les simulations de Monte Carlo sont effectuées pour $N.L$ spins où N désigne le nombre de spin dans la section transversale du nanofil et L représente la longueur du nanofil fixée à $L = 100$. Les deux aimantations M_s et M_σ des deux sous-réseau A et B sont définies par les équations suivantes:

$$M_s = \frac{1}{N.L/2} \left(\sum_i S_i \right) \quad et \quad M_\sigma = \frac{1}{N.L/2} \left(\sum_n \sigma_n \right) \quad (\text{III.2})$$

L'aimantation totale M_T et la susceptibilité totale χ sont données par les équations suivantes:

$$M_T = \frac{(M_s + M_\sigma)}{2} \quad et \quad \chi = \beta.N \left(\langle M_T^2 \rangle - \langle M_T \rangle^2 \right) \quad (\text{III.3})$$

Avec $\beta = 1/k_B T$ (k_B est la constante de Boltzmann et pour simplifier on prend $k_B = 1$).

La chaleur spécifique C_v et l'énergie interne $\langle E \rangle$ du système sont calculées selon les équations suivantes:

$$C_v = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\beta}{T} \left[\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right] \quad et \quad \langle E \rangle = \frac{1}{2.N.L} \langle H \rangle \quad (\text{III.4})$$

Au point de compensation, l'aimantation totale devrait disparaître. La température de compensation peut alors être déterminée par l'intersection des valeurs absolues des deux aimantations M_s et M_σ .

Nos données générées par les pas de Monte-Carlo par spin (MCS) peuvent varier entre 2×10^5 et 4×10^5 pas après avoir écarté les 10^5 premières itérations pour chaque température.

1.2 Résultats et discussion

Nous présentons dans ce paragraphe les principaux résultats obtenus pour un nanofil d'Ising ferrimagnétique à spins mixtes $(1/2; 1)$ composé de deux couches alternées. Pour simplifier, on note les interactions d'échanges réduites $R_1 = J_\sigma/J_s$ et $R = J_{int}/J_s$, où nous avons considéré le couplage d'échange J_s comme unité d'énergie.

1.2.1 Diagrammes de phase

Dans la figure III.2, nous avons rapporté la variation de la température critique T_c du système en fonction du champ cristallin longitudinal D/J_s pour des valeurs différentes du couplage antiferromagnétique R en absence du champ magnétique externe. Pour ce cas ferrimagnétique, nous avons trouvé que la température critique croît avec le champ cristallin longitudinale pour atteindre sa valeur maximale au voisinage de $D/J_s = 2.5$. Ensuite, nous voyons que ce diagramme de phase dans le plan $(T; D/J_s)$ présente une transition de phase du second ordre. D'autre part, on a remarquer que la température critique T_c du système est influencée le couplage d'échange R , T_c augmente si R diminue. Par ailleurs, aucun comportement de compensation de système n'a été obtenu.

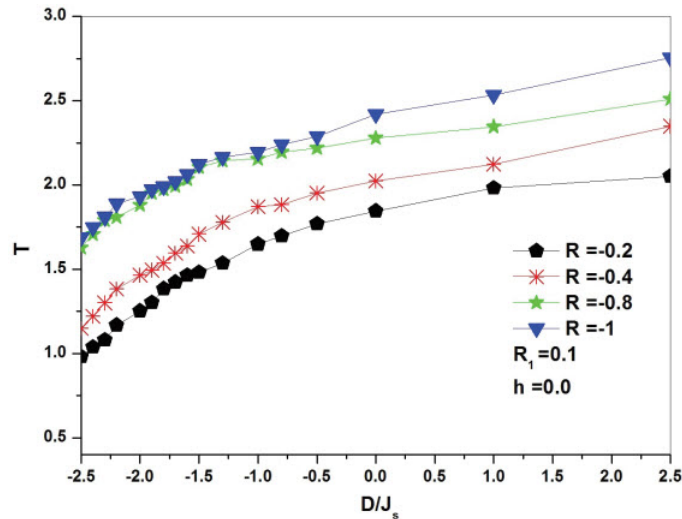


Figure III.2 – Diagramme de phase du système dans le plan $(T; D/J_s)$ pour les interactions d'échanges $R_1 = 0.1$, et $(R = -0.2; -0.4; -0.8; -1.0)$ [193].

1.2.2 Propriétés magnétiques et thermodynamiques

En l'absence des deux champs cristallin et magnétique externe ($D/J_s = 0$, $h = 0$), nous avons présenté dans les figures III.3(a-e) la variation thermique des aimantations totales M_T et partielles M_s et M_σ , de la susceptibilité totale, de la chaleur spécifique et d'énergie interne pour les différentes valeurs négatives de ($R = -0.2; -0.4; -0.8; -1.0$) et pour $R_1 = 1.8$.

La figure III.3(a) montre la variation thermique de l'aimantation totale M_T pour différentes valeurs négatives du couplage R ; elle augmente d'une valeur de saturation à $T = 0$ et s'annule à T_c . De plus, la température critique T_c augmente avec le couplage antiferromagnétique R . D'autre part, le système n'exhibe aucun comportement de compensation dans ces cas. Dans la figure III.3(b), on peut observer que, lorsqu'on augmente la température, l'aimantation M_s croît à partir de sa valeur de saturation $M_s = -1$ à $T = 0$. De même, l'aimantation M_σ diminue de façon monotone à partir de sa valeur de saturation $M_\sigma = 0.5$. On peut aussi voir que les deux aimantations M_σ et M_s s'annulent à T_c . Le même comportement est clairement observé dans les figures III.3(c-d) pour la susceptibilité totale et la chaleur spécifique car les courbes correspondantes présentent des pics dépendement de T_c . Lorsque'on augmente le couplage d'échange antiferrimagnétique R , les pics se déplacent vers les valeurs élevées de la température. Enfin, l'énergie interne totale est minimale à basse température, elle augmente brusquement lorsqu'elle atteint la température critique comme il est montré dans la figure III.3(e) et continue d'acroître lentement jusqu'à atteindre sa valeur maximale à haute température. Ainsi, l'augmentation des couplages d'échange antiferrimagnétiques R , implique une diminution de l'énergie interne.

Dans les figures III.4(a-e), nous avons étudié la variation des différentes grandeurs magnétiques et thermodynamiques de notre système en fonction de la température pour différentes valeurs du champ cristallin longitudinal D/J_s . Tout d'abord, il est à noter qu'aucun comportement de compensation n'a été observé. De plus, les deux aimantations totales M_T et partielles (M_σ , M_s) présentent seulement des transitions de phase du second ordre. Les courbes associées indiquent que la température critique augmente avec l'augmentation du champ cristallin longitudinal D/J_s . D'autre part, comme il est indiqué sur la figure III.4(c), la susceptibilité totale χ_T présente un pic correspond à la température critique T_c . Nous montrons que la température critique T_c croît lorsque le champ cristallin longitudinal D/J_s est augmenté.

La variation thermique de la chaleur spécifique Cv_T présente aussi un pic à T_c . Donc il est intéressant de noter que le champ cristallin longitudinal joue un rôle important dans les comportements critiques. La variation thermique de l'énergie interne totale E_T sous l'effet de D/J_s est tracée dans la figure III.4(e). Il est à noter que l'énergie interne augmente jusqu'à atteindre sa valeur maximale à haute température pour ($T > 3.0$) et pour les valeurs élevées du

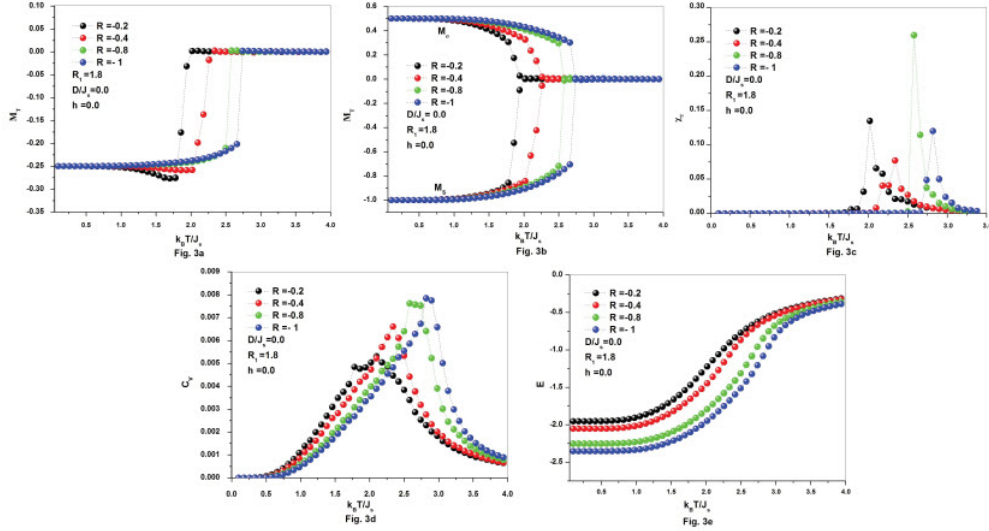


Figure III.3 – Aimantation longitudinale totale (a), Aimantations partielles des couches à spins S et σ (b), Susceptibilité magnétique totale χ (c), Chaleur spécifique C_v (d) et énergie interne totale E (e) en fonction de la température en l'absence des champs cristallin et magnétique externe pour des valeurs négatives sélectionnées de l'interaction d'échange R et pour la valeur fixée de $R_1 = 1.8$.^[193]

champ cristallin D/J_s .

1.2.3 Cycles d'hystérésis

Dans cette partie, nous présentons la variation des cycles d'hystérésis en fonction du champ cristallin longitudinal D/J_s , de couplage d'échange R et de la température $k_B T/J_s$. La figure III.5 illustre la variation des cycles d'hystérésis pour différentes valeurs du ($D/J_s = -1.5; -2.5; -3.0$) et pour les valeurs fixées de $k_B T/J_s = 0.2$, $R = -0.1$ et $R_1 = 0.5$. Nous avons trouvé que les aimantations présentent un comportement symétrique pour les valeurs positives et négatives du champs magnétiques externe appliqué h sous l'effet du D/J_s . En effet, si on diminue l'influence du champ cristallin longitudinal D/J_s , les boucles d'hystérésis deviennent de plus en plus étroites. Pour des valeurs de $D/J_s \leq -3.0$, on peut aussi voir l'apparition d'un phénomène d'hystérésis à trois boucles.

Pour les valeurs fixées de $k_B T/J_s = 0.2$, $D/J_s = -3.0$ et $R_1 = 0.5$, la figure III.6 illustre l'effet du couplage d'échange R sur le comportement des cycles d'hystérésis du système. Avec l'augmentation du couplage antiferromagnétique, les boucles d'extrémité deviennent plus étroites et celui du centre (champ coercitif) devient plus large.

Enfin, la figure III.7 illustre les propriétés des cycles d'hystérésis lorsqu'on augmente la température $k_B T/J_s$ pour des valeurs fixées de $D/J_s = -5.0$, $R = -0.1$ et $R_1 = 0.5$. À basse

III.1 Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1,1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers (In Materials Research Express 4(11) (2017) 116108.)

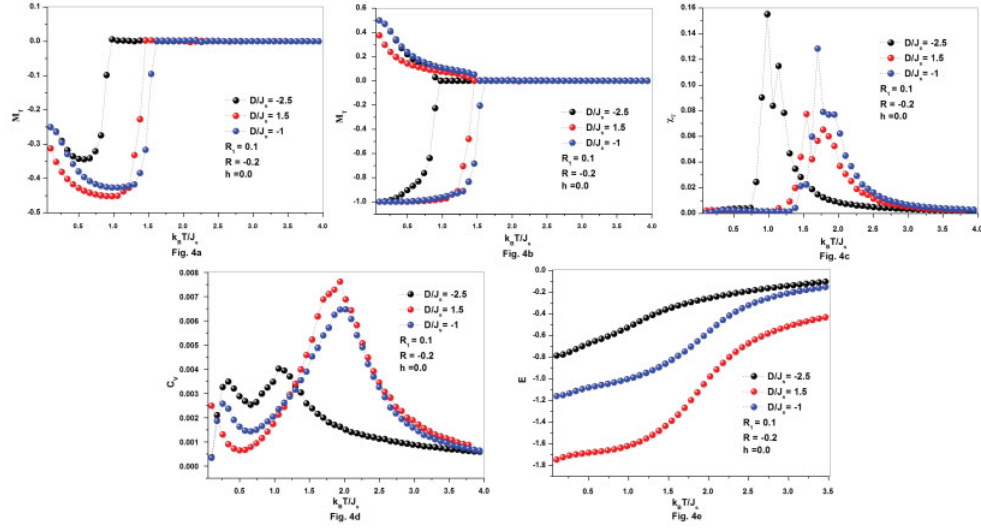


Figure III.4 – Aimantation longitudinale totale (a), aimantations partielles des couches S et σ (b), susceptibilité magnétique totale χ (c), chaleur spécifique C_v (d) et énergie interne totale E (e) en fonction de la température pour différentes valeurs négatives de D/J_s , et pour $R_1 = 0.1$, $R = -0.2$ [193].

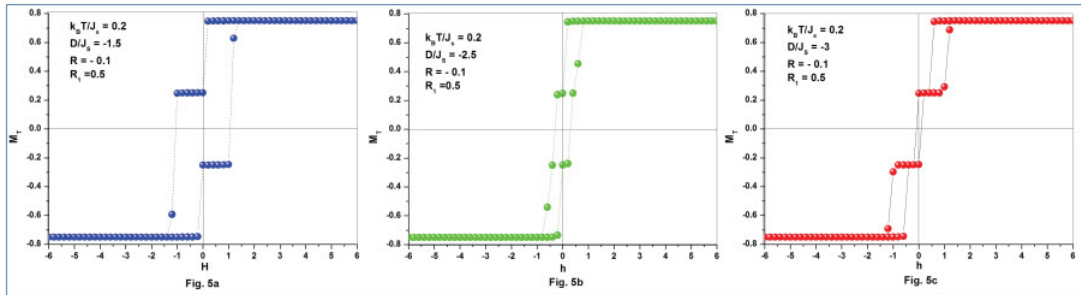


Figure III.5 – Cycles d'hystérésis pour les différentes valeurs du champ cristallin longitudinal D/J_s dans le cas où $k_B T/J_s = 0.2$, $R = -0.1$ et $R_1 = 0.5$ [193].

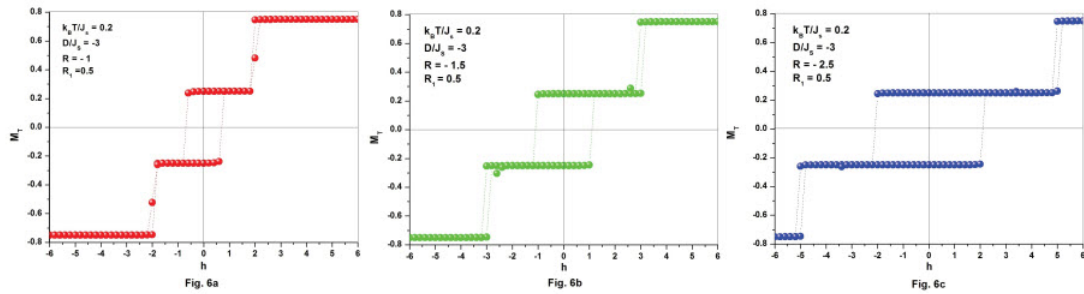


Figure III.6 – Cycles d'hystérésis pour les différentes valeurs de l'interaction d'échange antiferromagnétique R dans le cas où $k_B T/J_s = 0.2$, $D/J_s = -3.0$ et $R_1 = 0.5$ [193].

température, l'aimantation du système présente un phénomène d'hystérésis à trois boucles. Cependant, lorsqu'on augmente la température, la topologie des boucles d'hystérésis change et devient de plus en plus petites jusqu'à disparaître complètement au voisinage de la température critique. Nous remarquons que le phénomène d'hystérésis multi-boucles est principalement dû à la compétition entre les couplages d'échange d'intercouche dans les sous couches à spins- S et spins- σ , ce qui est en accord avec les résultats obtenus dans [194].

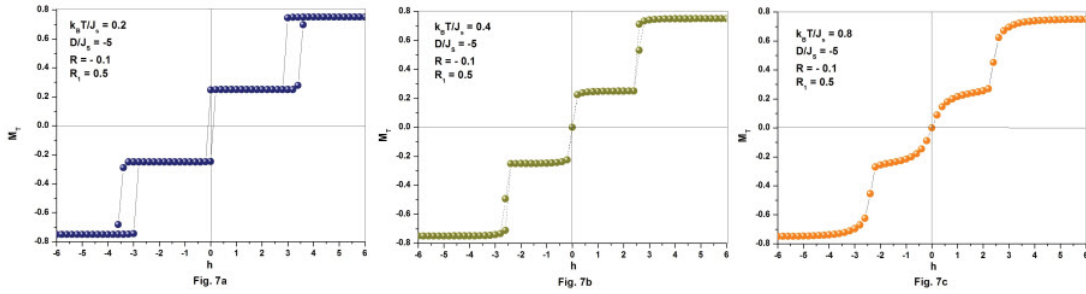


Figure III.7 – Cycles d'hystérésis pour les différentes valeurs de la température $k_B T / J_s$ dans le cas où $D/J_s = -5$, $R = -0.1$ et $R_1 = 0.5$ [193].

1.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exploré les propriétés thermodynamiques et magnétiques telles que l'aimantation totale, les aimantations de deux sous réseaux à spins- S et spins- σ , la susceptibilité totale, la chaleur spécifique, l'énergie interne et les cycles d'hystérésis d'un nanofil ferrimagnétique d'Ising à structure hexagonale et à spins-(1; 1/2) composé de deux couches alternées en utilisant la simulation de Monte-Carlo. Nous avons trouvé que ce système ne présente aucun comportement de compensation, et exhibe une transition de phase du second ordre. Aussi, un phénomène d'hystérésis à trois boucles a été obtenu à basse température et à des valeurs négatives du D/J_s . Ce phénomène de multi-boucles disparaît lorsqu'on augmente la température T , le champ cristallin longitudinal D/J_s et le couplage d'échange d'intercouche R .

2 Thermodynamic and magnetic properties of a mixed spins (3/2, 5/2) Ising nanowire with hexagonal structure: Monte Carlo simulation ([Indian Journal of Physics 2022](#))

2.1 Présentation du système étudié

On considère un nanofil d'Ising ferrimagnétique à structure hexagonale et à spins-(3/2; 5/2) soumis à l'action d'un champ cristallin longitudinal. L'Hamiltonien du système est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_s \sum_{\langle i,j \rangle} S_{iz} S_{jz} - J_\sigma \sum_{\langle n,m \rangle} \sigma_{nz} \sigma_{mz} - J_{int} \sum_{\langle i,n \rangle} S_{iz} \sigma_{nz} - D \left(\sum_i (S_{iz})^2 + \sum_n (\sigma_{nz})^2 \right) - h \left(\sum_i S_{iz} + \sum_n \sigma_{nz} \right) \quad (\text{III.5})$$

où $S_i = \pm(3/2)$ et $\sigma_n = \pm(5/2)$ dénotent les composantes longitudinales des opérateurs de spins dans les sites i et n suivantes (Oz), respectivement. J_s , J_σ et J_{int} désignent respectivement les couplages d'échanges entre les spins $S-S$, $\sigma-\sigma$ et $S-\sigma$. D/J_s et h sont respectivement le champ cristallin longitudinal et le champ magnétique externe. Les trois premières sommations portent sur tous les spins proches voisins de la couche S , de la couche σ et de l'interface, respectivement.

En utilisant la simulation de Monte-Carlo [20, 21], nous avons appliqué des conditions aux limites périodiques suivant la direction (Oz) qui est d'une épaisseur finie L et aux limites libres suivant les directions (Ox) et (Oy). Les simulations sont effectuées pour un nombre total de spins ($N.L$). N étant le nombre de spins de la section transversale du nanofil à la couche S (couche σ) et L désignant la longueur du nanofil $L = 100$. Nous avons utilisé la même structure de travail précédent figure (voir III.1), et les mêmes équations (III.2), (III.3) et (III.4).

2.2 Résultats et discussion

Dans l'étude précédente, il est montré que les systèmes mixtes ($S_A; 1$) avec $S_A \leq 1/2$ ne présente aucun comportements crtiques et tricritiques (la température de compensation et point tricritique). Nous allons donc passer à étudier les systèmes à spins-(1/2, 1) au systèmes à spins- $(S_A; S_B)$ avec $S_A > 1/2$ et $S_B > 1$ pour découvrir l'effet des couplages d'échange J_σ et J_{int} sur les propriétés magnétiques telles que l'aimantation longitudinale totale, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique totale et l'énergie interne en l'absence et en présence du champs cristallin et magnétique externe ($D/J_s = 0.0$; $h = 0.0$). Nous avons également examiner les

diagrammes de phase et le comportement des cycles d'hystérésis en fonction de D/J_s , J_{int} et T/J_s .

Pour simplifier nos calculs, on note que $k_B = 1$, et nous avons considéré les couplages d'échange réduites $R = J_{int}/J_s$ et $R_1 = J\sigma/J_s$.

2.2.1 Propriétés magnétiques et thermodynamiques

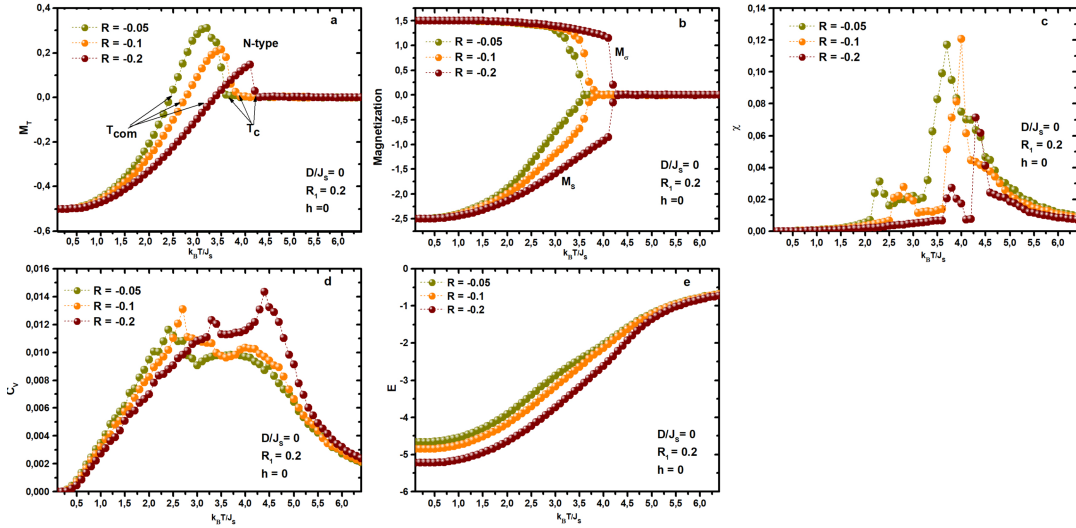


Figure III.8 – Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_σ et M_s (b), susceptibilité totale χ (c), chaleur spécifique C_v (d) et énergie interne (e) en fonction de la température en absence des champs cristallin et magnétique externe pour des valeurs négatives de ($R = -0.05; -0.1; -0.2$), où $R_1 = 0.2$ [194].

Les figures IV.1(a-e) illustrent la variation thermique des aimantations totales (M_T) et partielles (M_s , M_σ), la susceptibilité totale χ , la chaleur spécifique et l'énergie interne totale pour différentes valeurs négatives de couplage d'échange ($R = -0.05; -0.1; -0.2$) en l'absence de champs magnétiques longitudinaux $D/J_s = 0$ et $h = 0$ pour $R_1 = 0.2$. Dans la figure IV.1(a), nous pouvons voir que l'aimantation totale à $T = 0$ augmente d'une valeur de saturation $M_T = -0.5$ jusqu'à ce qu'elle s'annule à deux points. Le premier correspond à la température de compensation (T_{com}) type-N et le second à la température critique (T_c) lorsque $R > 0$. Si on diminue la valeur de couplage d'échange R , les deux températures T_{com} et T_c augmente. Ce résultat a été aussi trouvé par [195, 196]. Dans la figure IV.1(b), nous avons remarqué que l'aimantation M_s augmente d'une valeur de saturation $M_s = -2.5$ et l'aimantation M_σ diminue à partir de sa valeur de saturation $M_\sigma = 1.5$, elles s'annulent en deux points de température T_{com} et T_c ; ces deux températures croissent avec la décroissance de R . Dans le cas où $R = -0.2$,

les deux aimantations sont discontinues; ce qui signifie que le système présente une transition de phase du premier ordre. Ce phénomène de discontinuité de l'aimantation utilisant le modèle d'Ising ferrimagnétique en présence des champs cristallin et magnétique externe a été examiné par [195, 196]. En ce qui concerne la susceptibilité totale et la chaleur spécifique dans les figures IV.1(c-d), les courbes représentent deux pics; le premier correspond à la température de compensation T_{com} et le deuxième à celle critique T_c avec ($T_{com} < T_c$). Ces pics montent à des températures plus élevées avec la diminution de R . De plus, nous avons rapporté la variation thermique de l'énergie interne du système pour différentes valeurs de R sur la Figure IV.1(e). Nous avons constaté qu'à basse température l'énergie est minimale mais si on augmente la valeur de R l'énergie atteint sa valeur maximale, puis se stabilise à haute température. Aussi faut-il noter que la courbe présente une fluctuation au voisinage de T_{com} .

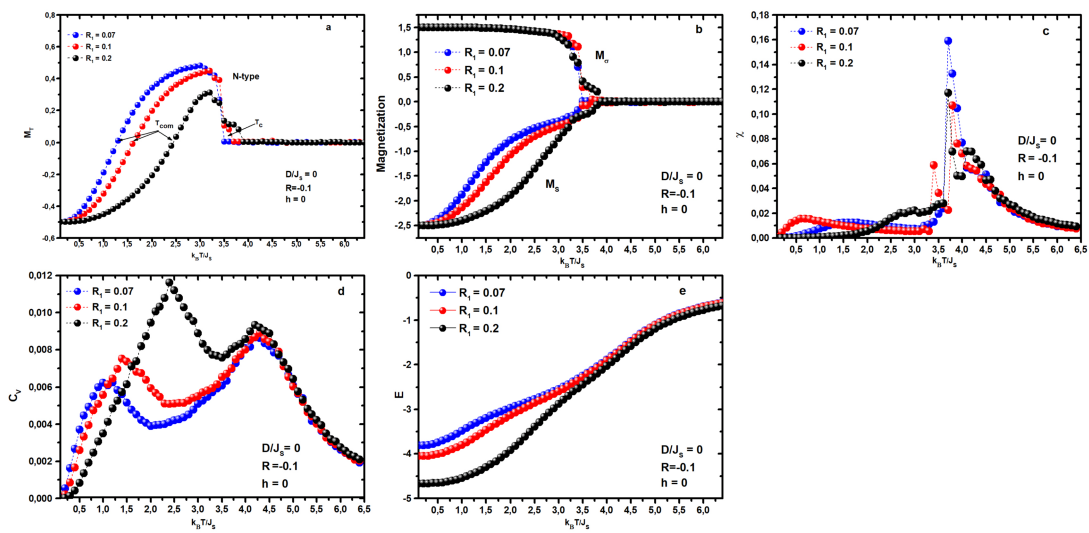


Figure III.9 – Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_σ et M_s (b), susceptibilité totale (c), chaleur spécifique (d) et énergie interne (e) en fonction de la température en absence des champs cristallin et magnétique externe pour les différentes valeurs de ($R_1 = 0.07; 0.1; 0.2$), où $R = -0.1$ [194].

Par ailleurs, dans les figures III.9(a-e), nous avons examiné la variation thermique des aimantations totales M_T et partielles (M_s , M_σ), de la susceptibilité totale, de la chaleur spécifique et de l'énergie interne totale pour différentes valeurs de couplage d'échange ($R_1 = 0.07; 0.1; 0.2$) dans le cas où $D/J_s = 0.0$ $R = -0.1$ et $h = 0.0$. Dans la figure III.9(a), l'aimantation totale M_T augmente d'un point de saturation $M_T = -0.5$ et s'annule en deux points T_{com} et T_c . Par conséquent, la courbe présente l'aimantation totale de type-N qui a été prévue par la théorie classique de Néel [116]. Ces comportements ont été confirmés par d'autres études en relation avec la compensation dynamique [197]. De plus, il est noté que le système présente des transi-

Chapter III. Étude des propriétés magnétiques dans les nanofils hexagonaux à spins mixtes et à deux couches alternées

tions de phase du premier ordre pour ($R_1 = 0.07; 0.1$) et de second ordre pour ($R_1 = 0.2$). En effet, si nous avons diminuée le couplage R_1 , les températures de compensation T_{com} et critique T_c augmentent. Dans la figure III.9(b), nous avons remarqué que les deux aimantations partielles M_s et M_σ s'annulent à T_c . Dans les figures III.9(c-d), comme mentionné précédemment, les courbes de susceptibilité magnétique totale et de la chaleur spécifique totale présentent respectivement deux pics aux températures de compensation T_{com} et critique T_c .

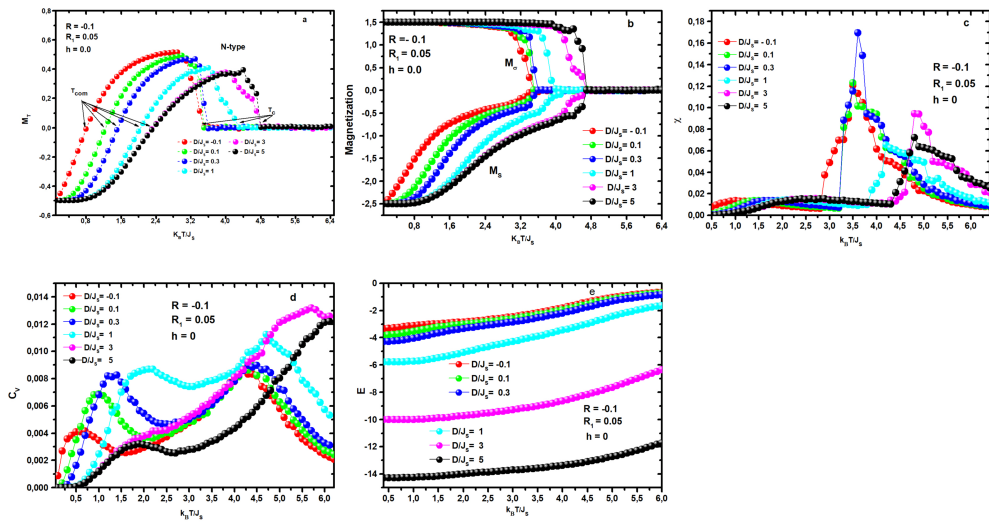


Figure III.10 – Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_σ et M_s (b), susceptibilité magnétique totale (c), chaleur spécifique (d) et énergie interne (e) en fonction de la température pour différentes valeurs de ($D/J_s = -0.1; 0.1; 0.3; 1.0; 3.0; 5.0$), où $R = -0.1$, $R_1 = 0.05$ [194].

Nous avons également étudié les effets du champ cristallin longitudinal D/J_s sur les propriétés magnétiques pour des valeurs fixées $R = -0.1$, $R_1 = 0.05$ et $h = 0$. Dans ce cas, nous avons obtenu deux températures pour les valeurs positives et négatives du D/J_s ; la température de compensation T_{com} et la température critique T_c . Les deux températures augmentent lorsque D/J_s augmente. Il est à noter que la forme de l'aimantation totale présente un comportement du type- N et les deux aimantations partielles M_σ et M_s du système présentent une transition de phase du second ordre dans les figures III.10(a-b). Dans le cas où $D/J_s = 5$, les deux aimantations M_σ et M_s sont discontinues, ce qui explique que le système présente une transition de phase du premier ordre. Le même comportement a été constaté par [195, 196]. Dans les figures III.10(c-d), nous avons examiné l'effet du champ cristallin longitudinal D/J_s sur la susceptibilité totale χ et sur la chaleur spécifique. Les deux courbes présentent des pics à T_c , ce comportement est similaire à celui de l'aimantation dans la figure III.10(a). Il est remarqué que T_c est influencé par la variation du champ cristallin longitudinal D/J_s . En ce

qui concerne la température de compensation, on remarque que chaque changement de D/J_s provoque une variation de T_{com} . D'autre part, l'effet du champ cristallin longitudinal D/J_s sur l'énergie interne se voit dans la Figure III.10(e), où nous nottons que l'énergie interne augmente avec la diminution du champ cristallin longitudinal fortement près de la température critique.

2.2.2 Cycles d'hystérésis

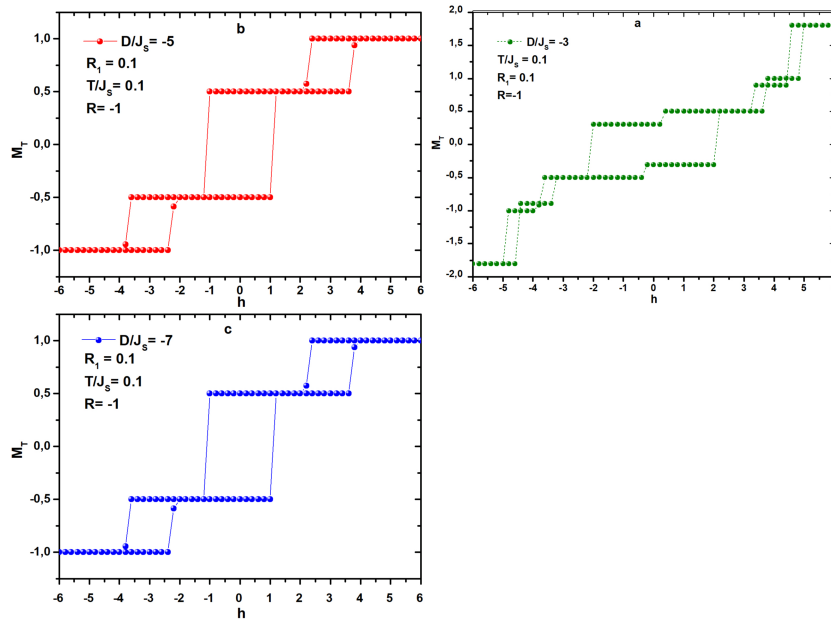


Figure III.11 – Cycles d'hystérésis pour des valeurs fixes de $R = -1, 0$, $R_1 = 0, 1$, $T/J_s = 0, 1$ et pour les différentes valeurs négatives de $D/J_s = -3.0$ (a); $D/J_s = -5.0$ (b); et $D/J_s = -7.0$ (c) [194].

Dans cette partie, nous avons étudié l'effet du champ cristallin longitudinal D/J_s , de la température T/J_s et de couplage d'échange R sur les cycles d'hystérésis. Dans les figures III.11(a-c), les cycles d'hystérésis ont été examinés pour différentes valeurs négatives du champ cristallin longitudinal D/J_s , on voit qu'il y a une certaine symétrie sur les courbes des cycles d'hystérésis pour les valeurs positives et négatives du champ magnétique externe. Dans le cas où $D/J_s = -3.0$, nous avons remarqué que la figure III.11(a) présente le phénomène d'hystérésis à sept boucles et sept paliers mais lorsqu'on diminue le champ cristallin longitudinal au $D/J_s = -5.0$ où $D/J_s = -7.0$, le comportement de multi-boucles disparaît simultanément dans les figures III.11(b-c) et le nombre des boucles se réduit à trois. Ces résultats sont comparés à ceux de [198, 199].

Dans les figures III.12(a-d), nous avons augmenté la température du système T/J_s pour

certaines conditions utilisées auparavant sur la figure III.12(a) ($R = -1.0$, $D/J_s = -3.0$ et $R_1 = 0.1$) pour étudier l'effet de la température sur les cycles d'hystérésis. Par conséquent, le phénomène d'hystérésis à sept boucles magnétiques a également été observé à basse température $T/J_s = 0.1$. Le comportement d'hystérésis à multi-boucles disparaît lorsqu'on augmente la température jusqu'à sa valeur critique.

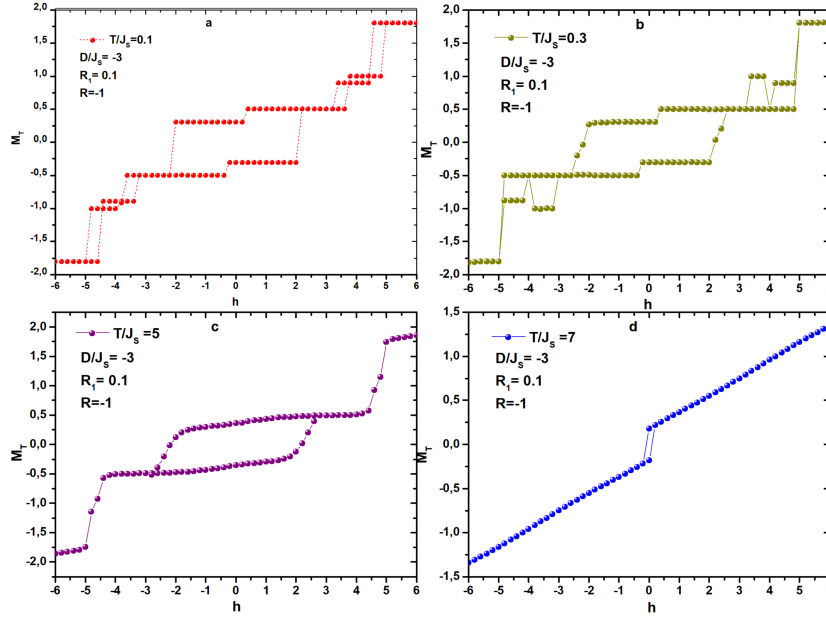


Figure III.12 – Cycles d'hystérésis pour des valeurs fixes de $R = -1.0$, $R_1 = 0.1$, $D/J_s = -3.0$ et pour les différentes valeurs $T/J_s = 0.1$ (a); $T/J_s = 0.3$ (b); $T/J_s = 5.0$ (c); et $T/J_s = 7.0$ (d) [194].

Les figures III.13(a-d) présentent l'effet des interactions d'échange R sur les comportements des cycles d'hystérésis du système pour des valeurs sélectives effectuées précédemment dans la figure III.11(a) ($D/J_s = -3.0$, $R_1 = 0.1$, et $T/J_s = 0.1$). Nous voyons clairement que le phénomène d'hystérésis à multi-boucles disparaît lorsque R augmente jusqu'à la valeur positive $R = 1.5$ et le champ coercitif magnétique devient s'élargie. Cela signifie que les cycles d'hystérésis peuvent s'aimanter lorsqu'ils sont soumis à un champ magnétique externe (cas d'un matériau magnétique doux). Nos résultats ont été déjà comparé avec d'autres études significatives [192, 193].

2.2.3 Diagrammes de phase

Dans cette partie, dans la figure III.14, nous avons étudié en premier lieu l'effet des interactions d'échange R_1 sur la température critique T_c et celle de compensation T_{com} en l'absence

III.2 Thermodynamic and magnetic properties of a mixed spins (3/2, 5/2) Ising nanowire with hexagonal structure: Monte Carlo simulation [\(Indian Journal of Physics 2022\)](#)

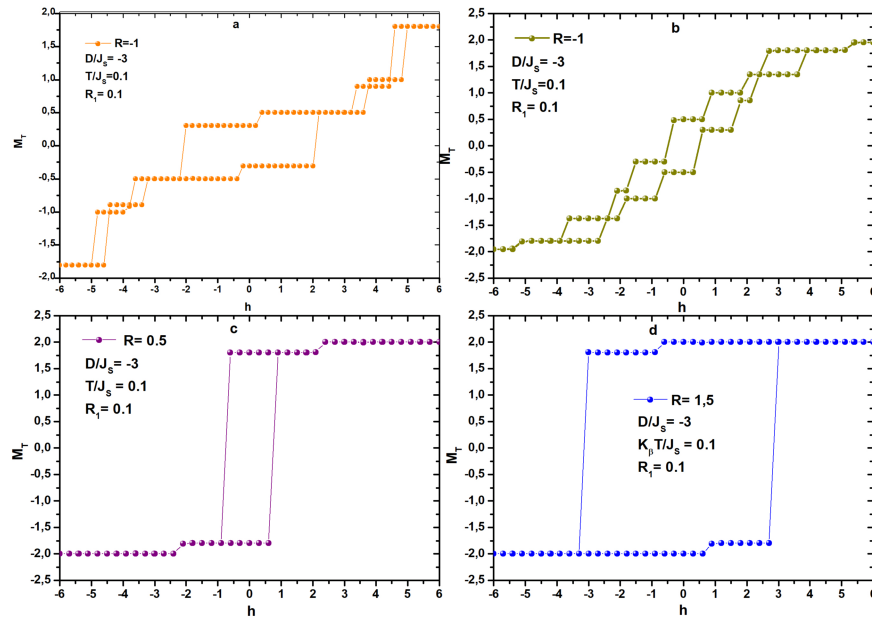


Figure III.13 – Cycles d'hystérésis pour des valeurs fixées de $R_1 = 0.1$, $D/J_s = -3.0$, et $T/J_s = 0.1$ et pour les différentes valeurs $R = -1.0$ (a); $R = -0.5$ (b); $R = 0.5$ (c); et $R = 1.5$ (d) [194].

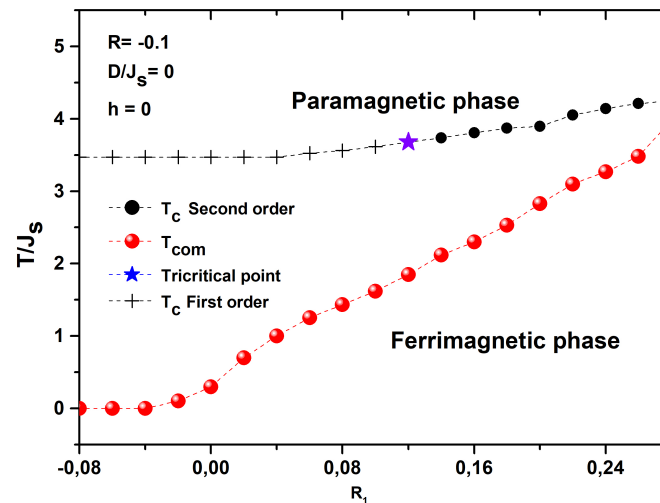


Figure III.14 – Variation de température critique et de température de compensation en fonction de l'interaction d'échange R_1 en l'absence des champs cristallin et magnétique externe à une valeur fixée de $R = -0,1$ [194].

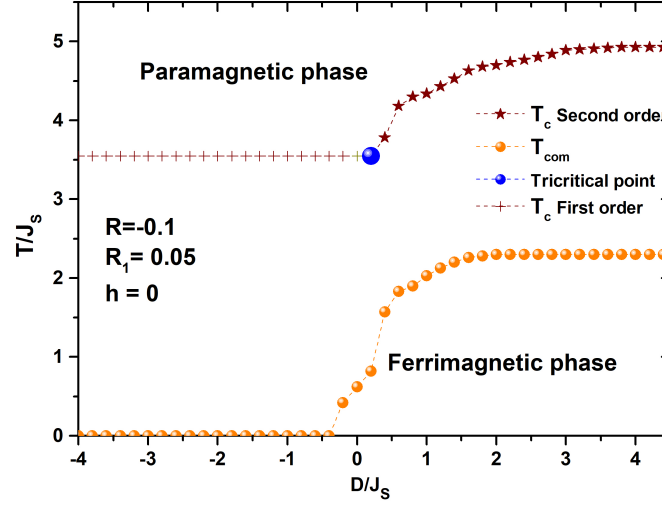


Figure III.15 – Variation de température critique et de température de compensation en fonction du champ cristallin D/J_s pour $R = -0.1$ et $R_1 = 0.05$ [194].

des champs cristallin et magnétique externe ($D/J_s = 0.0$, $h = 0.0$) pour la valeur fixée $R = -0.1$. Nous pouvons voir que le système présente une transition de phase du premier ordre si ($R_1 < 0.1$) et du second ordre si ($R_1 > 0.1$). De plus, nous avons trouvé que le système peut exhiber des points tricritiques dans le cas où ($R_1 = 0.1$).

On en déduit que la température critique T_c et celle de compensation T_{com} augmentent quand le couplage d'échange R_1 augmente.

En deuxième lieu, dans la figure III.15, nous avons présenté la variation des températures T_c et T_{com} sous l'effet du champ cristallin longitudinal dans le plan $(T/J_s; D/J_s)$ pour des valeurs fixées $R_1 = -0.05$, $R = -0.1$ en l'absence du champ magnétique externe $h = 0.0$. Les résultats obtenus confirment que le système présente une transition de phase du premier ordre si ($D/J_s < 0.0$) et du second ordre si ($D/J_s > 0.0$). Pour les valeurs négatives du champ cristallin longitudinal si ($D/J_s < 0.0$), la température critique T_c reste inchangée $T_c = 3.5$ et aucune température T_{com} a été détectée. Généralement on voit que si on augmente D/J_s , les deux températures T_{com} et T_c augmentent. Ces résultats ont été discutés théoriquement par [197, 198]. On peut conclure que la température T_{com} est très influencée par le changement du champ cristallin longitudinal D/J_s et par le couplage d'échange R_1 .

2.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié un nanofil d'Ising ferrimagnétique à structure hexagonale alternée et à spin mixte (3/2; 5/2) en utilisant la méthode de Monte-Carlo. La variations thermique des propriétés magnétiques, les cycles d'hystérésis et les diagrammes de phase dans les plans $(T/J_s; D/J_s)$ et $(T/J_s; R_1)$ sont examinés en détail. Nos résultats numériques obtenus montrent que ce système présente un comportement de compensation dans le cas où le champ cristallin est positive $D/J_s > 0.0$ et si $R_1 > -0.08$. Lorsque $D/J_s = 0.0$ où $R_1 = 0.12$, on voit clairement que le système exhibe un comportement tricritique. D'autre part, la transition de phase du premier ordre a été trouvée si $0.0 > D/J_s$, pour $R_1 < 0.12$ et $R = -0.1$, et exhibe une transition du second ordre si $D/J_s > 0.0$, pour $R_1 > 0.12$ et $R = -0.1$. En outre, le phénomène d'hystérésis à sept boucles est obtenu à basse température quand le champ cristallin longitudinal est négatif. Ce comportement disparaît avec l'augmentation de la température T/J_s et du champ cristallin D/J_s . Nos résultats sont en accord avec d'autres études théoriques [195–198] et expérimentales [199, 200].

3 The magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-(3/2; 2) hexagonal Ising nanowire system with alternate layers (Solid State Communications 336 (2021) 114418.)

3.1 Présentation du système étudié

Nous considérons un nanofil d'Ising ferrimagnétique à spin mixte $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ et $S = \pm 2, \pm 1, 0$ en présence des champs cristallin et magnétique externe. Nous avons utilisé la même structure hexagonale alternée représentée dans la figure III.1, et l'Hamiltonien utilisé III.5.

Les grandeurs physiques étudiées sont déjà présents dans les équations suivantes : I.51, I.52, III.2, III.3 et III.4.

3.2 Résultats et discussion

Dans ce travail, nous avons mis en évidence les effets du champ cristallin longitudinal D/J_s , du champ magnétique externe h , des couplage d'échange J_σ et J_{int} sur l'aimantation totale, les deux aimantations partielles, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique totale,

Chapter III. Étude des propriétés magnétiques dans les nanofils hexagonaux à spins mixtes et à deux couches alternées

l'énergie interne d'un nanofil ferrimagnétique pour différents paramètres physiques. Nous avons également examiné le comportement de compensation dans les diagrammes de phase, ainsi que les variations des cycles d'hystérésis.

Pour simplifier nos calculs, on note que $k_B = 1$ et $J_s = 1$ et les interactions d'échange réduites $R = J_{int}/J_s$ et $R_1 = J_\sigma/J_s$.

3.2.1 Propriétés magnétiques et thermodynamiques

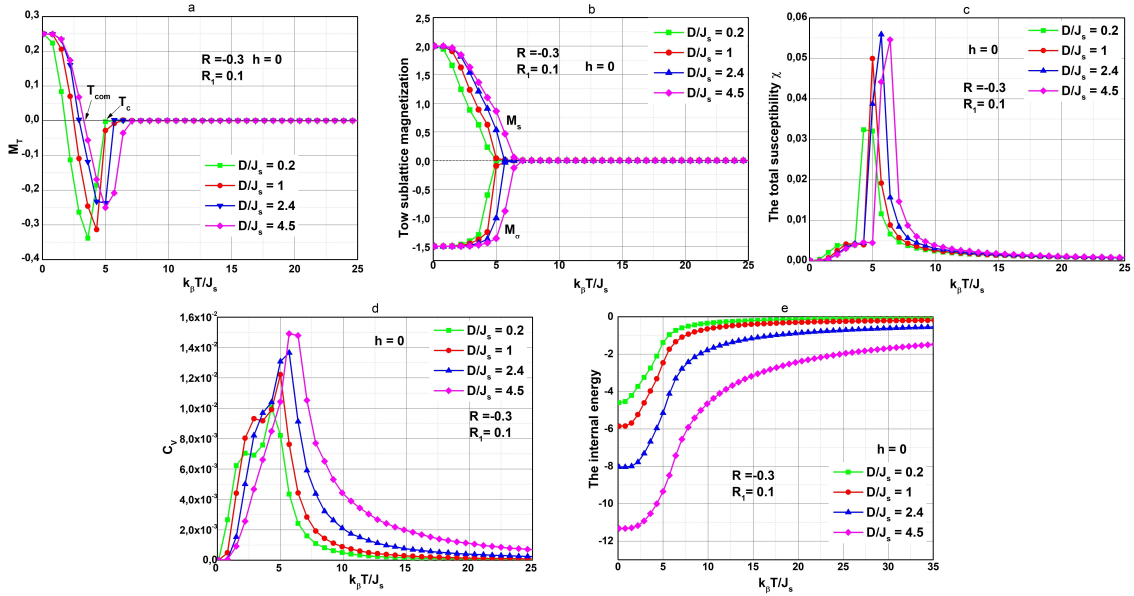


Figure III.16 – Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_s et M_σ (b), susceptibilité magnétique totale χ (c), chaleur spécifique (d) et énergie interne (e) en fonction de la température en absence du champ magnétique externe pour des valeurs positives de $(D/J_s = 0.2; 1.0; 2.4; 4.5)$ à des valeurs fixées $R = -0.3$, et $R_1 = 0.1$ [109].

Dans cette première partie, les figures III.16(a-e) montrent la variation thermique d'aimantation totale M_T et de deux aimantations partielles (M_s et M_σ), de susceptibilité magnétique totale, de la chaleur spécifique et de l'énergie interne en l'absence du champ magnétique externe pour de différentes valeurs positives du champ $D = 0.2, 1.0, 2.4, 4.5$ où $R = -0.3$ et $R_1 = 0.1$. Dans la figure III.16(a), nous observons que la courbe total exhibe deux zéros successifs. Le premier correspond à la température de compensation T_{com} et le second correspond à la température critique T_c . Les deux températures T_{com} et T_c augmentent si on augmente D/J_s . Il est à noter que l'aimantation totale M_T du système exhibe un comportement de type-N qui a été cité par Néel [116]. Dans la figure III.16(b), nous avons remarqué que l'aimantation partielle M_s diminue de sa valeur de saturation $M_s = 2$. Alors que l'aimantation partielle M_σ augmente de

III.3 The magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-(3/2; 2) hexagonal Ising nanowire system with alternate layers (Solid State Communications 336 (2021) 114418.)

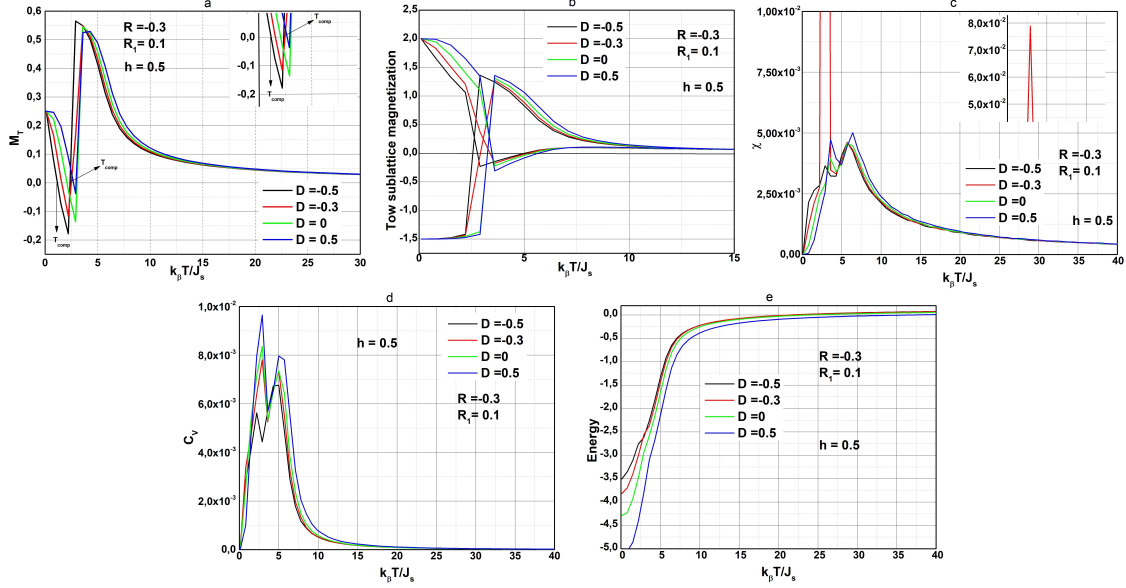


Figure III.17 – Aimantation totale M_T (a), aimantations partielles M_s et M_σ (b), susceptibilité magnétique totale χ (c), chaleur spécifique (d) et énergie interne (e) en fonction de la température pour différentes valeurs de $(D/J_s = -0.5; -0.3; 0.0; 0.5)$ à des valeurs fixées $h = 0.5$, $R = -0.3$ et $R_1 = 0.1$ [109].

façon monotone d'une valeur de saturation $M_\sigma = -1.5$. De plus, ces deux aimantations M_s et M_σ s'annulent à la température critique T_c . T_c augmente simultanément avec l'augmentation du D/J_s pour $D/J_s < 4.5$. Dans les figures III.16(c-d), on constate que la susceptibilité totale χ_T et la chaleur spécifique C_v confirme l'existence de deux températures T_{com} et T_c , respectivement. Les courbes présentent deux pics au voisinage de T_{com} et T_c . La variation de l'énergie interne en fonction de la température est présente dans la figure III.16(e). Nous avons noté que l'énergie interne est minimale à basse température. Si on augmente la température, l'énergie augmente fortement à côté de T_c du système et présente une fluctuation au voisinage de T_{com} pour $D/J_s < 4.2$. Si on diminue le champ cristallin D/J_s jusqu'à $D/J_s = 0.2$, on constate que l'énergie interne augmente. Nos résultats ont été comparé avec ceux obtenus lors de l'étude du nanoruban d'Ising rectangle à structure cœur-coquille ferrimagnétique et à spin mixte (3/2; 2) utilisant la méthode de Monte-Carlo [201].

Les figures III.17(a-e) illustrent la variation des propriétés magnétiques telles que les aimantations totales et partielles, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique et l'énergie interne en fonction de température en appliquant le champ magnétique externe $h = 0.5$ pour différentes valeurs du champ cristallin longitudinal ($D = -0.5, -0.3, 0.0, 0.5$) et pour des valeurs fixées $R = -0.3$, et $R_1 = 0.1$. Dans la Figure III.17(a), nous avons montré que le système peut exhiber deux points de compensation dans le cas où $0.5 > D/J_s > -0.5$. Ce type de com-

Chapter III. Étude des propriétés magnétiques dans les nanofils hexagonaux à spins mixtes et à deux couches alternées

portement de compensation a été déjà trouvé par des études [201–203]. De plus, nous pouvons clairement voir que la forme de la courbe d'aimantation totale définie par un comportement type-W selon la classification de Néel. La figure III.17(b) présente les aimantations M_s et M_σ . Lorsque le champ cristallin longitudinal atteint sa valeur $D/J_s = 0.5$, le point d'intersection entre les deux d'aimantations du sous-réseau M_s et M_σ correspondant à la T_{com} . De plus, M_s et M_σ s'annulent à T_c . Dans les figures III.17(c-d), la susceptibilité totale χ_T et la chaleur spécifique C_v présentent deux pics à T_c et T_{com} respectivement, avec ($T_c > T_{com}$). Enfin, nous avons examiné l'influence de la variation thermique sur l'énergie interne du système dans la figure III.17(e). Nous pouvons observer que la courbe d'énergie interne augmente au voisinage de la température critique du système T_c . Par conséquent, si nous augmentons le champ cristallin longitudinal D/J_s , l'énergie interne diminue.

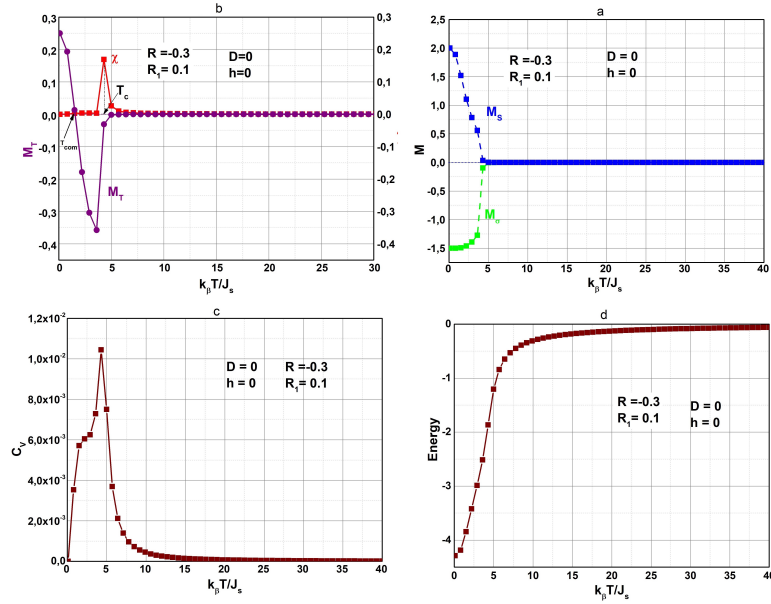


Figure III.18 – Aimantations partielles M_s et M_σ (a), aimantation totale M_T , susceptibilité magnétique totale χ (b), chaleur spécifique (c) et énergie interne (d) en fonction de la température en absence des champs cristallin et magnétique externe où $R = -0.3$ et $R_1 = 0.1$ [109].

Dans les figures III.18(a-d) nous avons examiné la variation des aimantations, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique et l'énergie interne en fonction de la température en l'absence des champs cristallin et magnétique externe ($D = 0.0$ et $h = 0.0$) dans le cas où $R = -0.3$ et $R_1 = 0.1$. La figure III.18(a) montre que les deux courbes d'aimantation tendent vers zéro à la température critique $T_c = 4.9$ et présentent une transition de phase du second ordre. La figure III.18(b) présente la variation de susceptibilité totale χ_T et celle d'aimantation totale M_T . Nous avons remarqué que les deux courbes présentent un seul point de compensa-

tion T_{com} et l'aimantation totale expriment un comportement de type-N. En comparaison avec les résultats obtenus à partir des figures III.16(a) et III.17(a). Nous déduisons que le système exhibe deux points de compensation, ce comportement est lié avec le champ magnétique externe appliqué. D'un autre coté, dans la figure III.18(c), la courbe de la chaleur spécifique C_v présente un pic correspond à T_c et une fluctuation au voisinage de T_{com} . Même comportement que celui dans la figure III.18(b). La variation thermique d'énergie interne est tracée dans la figure III.18(d). Il est montré que l'énergie interne augmentent avec l'augmentation de la température et s'intensifie près de la température critique.

Les figures III.19(a-e) illustrent l'effet de l'interaction d'échange R sur les propriétés magnétiques et thermodynamiques du système pour différentes valeurs de ($R = -0.3, -0.7, -1.0, -2.0$) en fixant $R_1 = 0.1$, $D = -0.5$ et $h = 0.5$. Les figures III.19(a-b), représentent l'effet de couplage d'échange sur l'aimantation totale M_T et les deux aimantations M_s et M_σ . Nous avons constaté que pour ($R > -2.0$), l'aimantation totale exhibe trois zéros successifs correspondant respectivement à la première et deuxième température de compensation et à la température critique. Le point d'intersection des deux aimantations M_s et M_σ correspondent à la T_{com} qui disparaît lorsqu'on diminue le couplage R . Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus par [201–204]. Nous avons aussi remarqué que l'aimantation totale M_T présente un comportement de type-S. Comme mentionné ci-dessus, la figure III.19(e) montre la variation de l'énergie interne en fonction de la température. Nous pouvons observer que si l'interaction d'échange R diminue l'énergie interne. On peut conclure que la température de compensation est très influencée par le changement du champ cristallin, du champ magnétique externe et de la l'interaction d'échange.

3.2.2 Diagrammes de phase

Dans cette deuxième partie, la figure III.20 montre les diagrammes de phase dans le plan ($T; D/J_s$) pour des valeurs fixées $R = -0.3$, $h = 0.5$ et $R_1 = 0.1$. Nous avons observé que l'aimantation totale présente des transitions de phase du second ordre. Ainsi, la température de transition T_c (Température critique) reste stable dans le cas où ($D/J_s < 0.0$) et augmente lentement lorsque ($D/J_s > 0.0$). En ce qui concerne les températures de compensation T_{com1} , et T_{com2} , elles augmentent si D/J_s augmente.

La figure III.21 représente les diagrammes de phase dans le plan ($T; R$) pour des valeurs fixées $D = -0.5$, $h = 0.5$ et $R_1 = 0.1$, dont, le résultat montre que l'aimantation thermique totale présente des transitions de phase du second ordre. Ainsi, la température de transition T_c (Température critique) et les deux températures de compensation T_{com1} et T_{com2} augmentent

Chapter III. Étude des propriétés magnétiques dans les nanofils hexagonaux à spins mixtes et à deux couches alternées

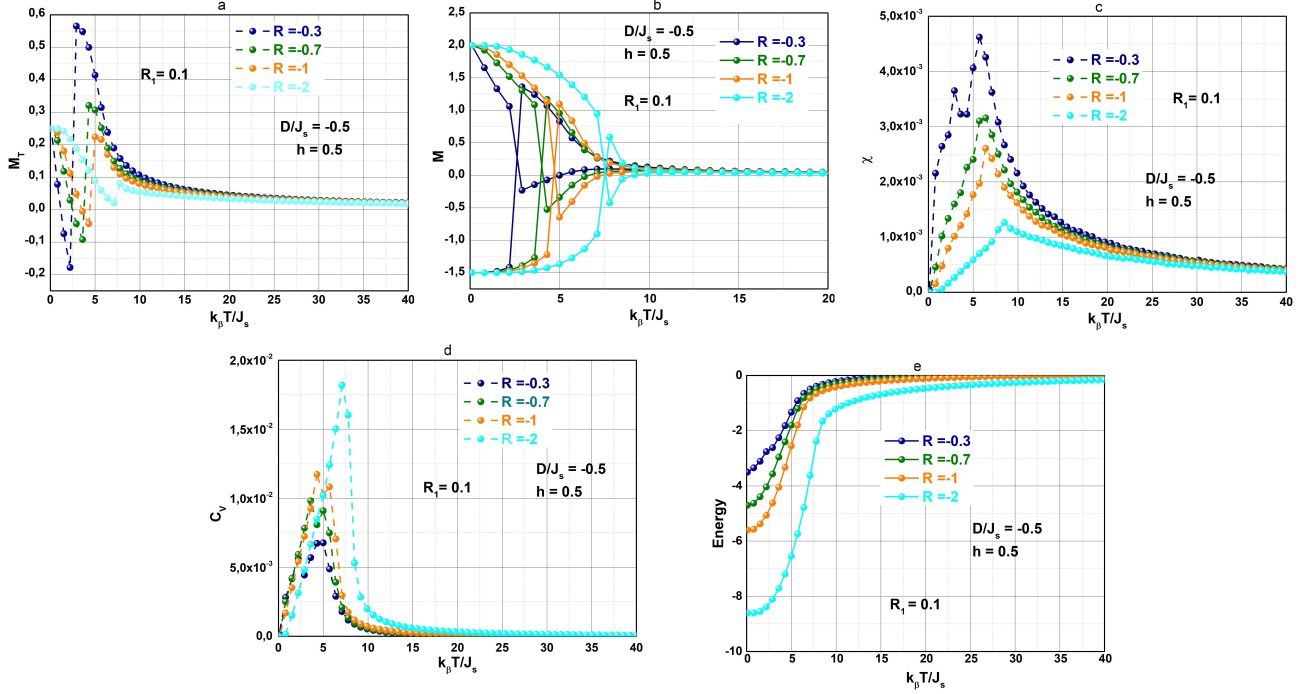


Figure III.19 – Variation de l'aimantation totale M_T (a), les aimantations partielles M_s et M_σ (b), la susceptibilité totale magnétique χ (c), la chaleur spécifique (d) et l'énergie interne (e) en fonction de la température en absence du champ magnétique externe pour les différentes valeurs sélectionnées de ($R = -0.3; -0.7; -1.0; -2.0$), à $R_1 = 0.1$, $D/J_s = -0.5$ et $h = 0.5$ [109].

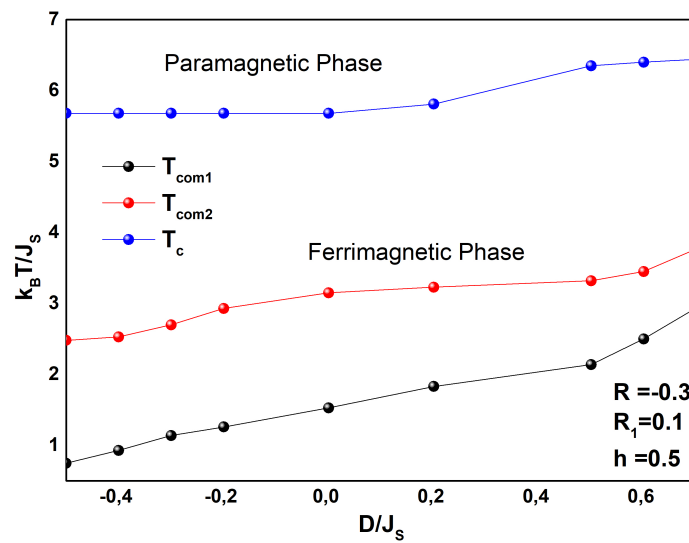


Figure III.20 – Diagramme de phase dans le plan $(T; D/J_s)$ à des valeurs fixées $R = -0.3$, $h = 0.5$ et $R_1 = 0.1$ [109].

III.3 The magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-(3/2; 2) hexagonal Ising nanowire system with alternate layers (Solid State Communications 336 (2021) 114418.)

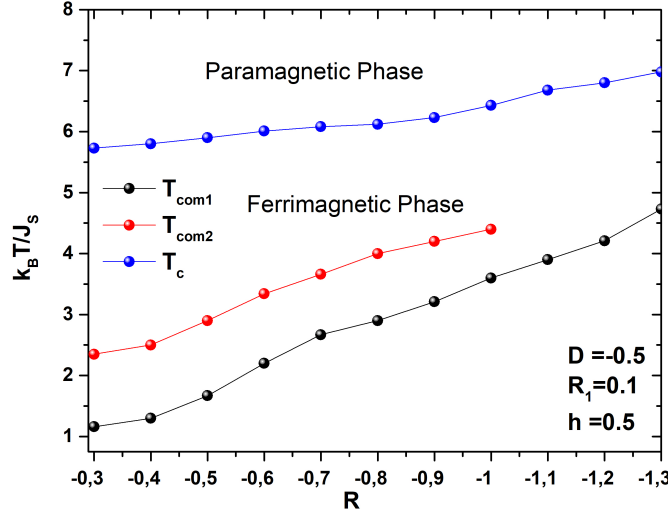


Figure III.21 – Diagramme de phase dans le plan $(T; R)$ à des valeurs fixées $D/J_s = -0.5$, $h = 0.5$ et $R_1 = 0.1$ [109].

lentement avec la diminution de l'interaction d'échange R . Si $R_1 < -1$ le système exhibe un seul point de compensation.

3.2.3 Cycles d'hystérésis

Dans cette dernière partie, nous avons étudié les effets de la température T/J_s et du champ cristallin longitudinal D/J_s sur le comportement des cycles d'hystérésis du système. Dans les figures III.22(a-f), nous avons étudié les effets de la température T/J_s sur l'aimantation totale pour des valeurs fixées de $D = -1.0$, $R = -1.0$, et $R_1 = 0.1$, et pour les températures ($T/J_s = 1.0, 2.0, 3.0, 5.0, 6.0, 7.0$). Nous remarquons que les courbes d'aimantation sont symétriques pour les champs magnétiques externes positifs et négatifs $h = \pm 8$. Elles présentent aussi le phénomène d'hystérésis à trois boucles à basse température ($T \leq 2$), qui disparaît lorsqu'on augmente la température ($T > 2$). Ce phénomène à multi-boucles a été obtenu théoriquement pour un nanofil de Blume-Capel [205], pour un nanoruban de graphène de type ladder [206], expérimentalement pour $CoFeB/Cu$, $CoNiP/Cu$, $FeGa/py$, et $FeGa/CoFeB$ [207]. Nous notons que ce phénomène d'hystérésis à multi-boucles a des applications potentielles dans les applications multi-états [208].

Les figures III.23(a-e) illustrent l'effet du champ cristallin longitudinal à différentes valeurs négatives ($D = -2.0, -2.5, -3.0, -4.0, -6.0$) sur les cycles d'hystérésis pour $R = -0.3$, $R_1 =$

Chapter III. Étude des propriétés magnétiques dans les nanofils hexagonaux à spins mixtes et à deux couches alternées

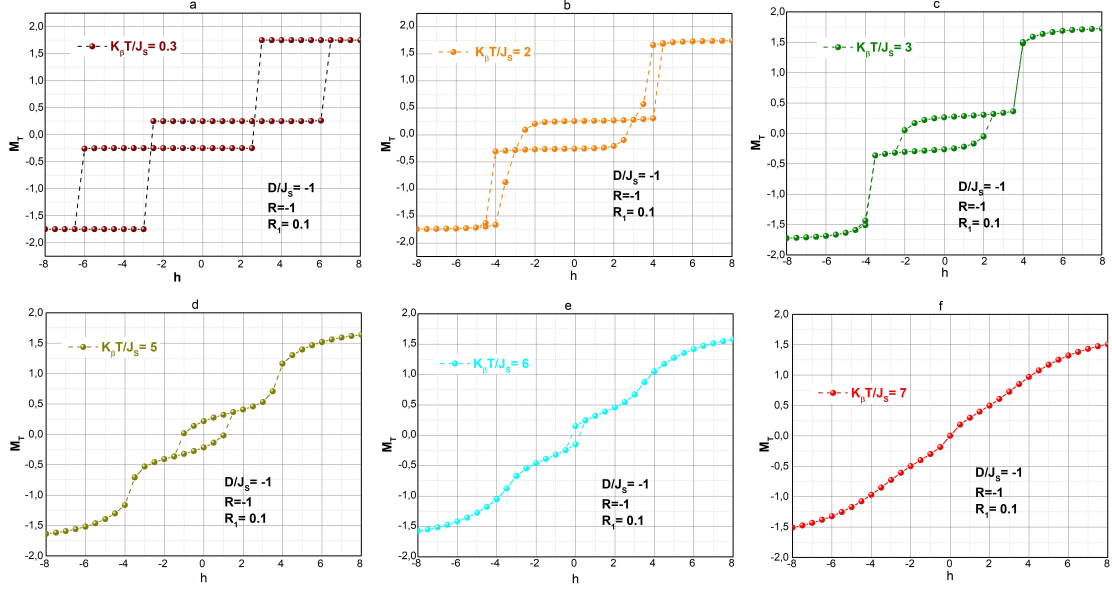


Figure III.22 – Cycles d’hystérésis à des valeurs fixées $D/J_s = -1.0$, $R = -1.0$, $R_1 = 0,1$ et où $T/J_s = 0.3$ (a); $T/J_s = 2.0$ (b); $T/J_s = 3.0$ (c); $T/J_s = 5.0$ (d); $T/J_s = 6.0$ (e); $T/J_s = 7.0$ (f) [109].

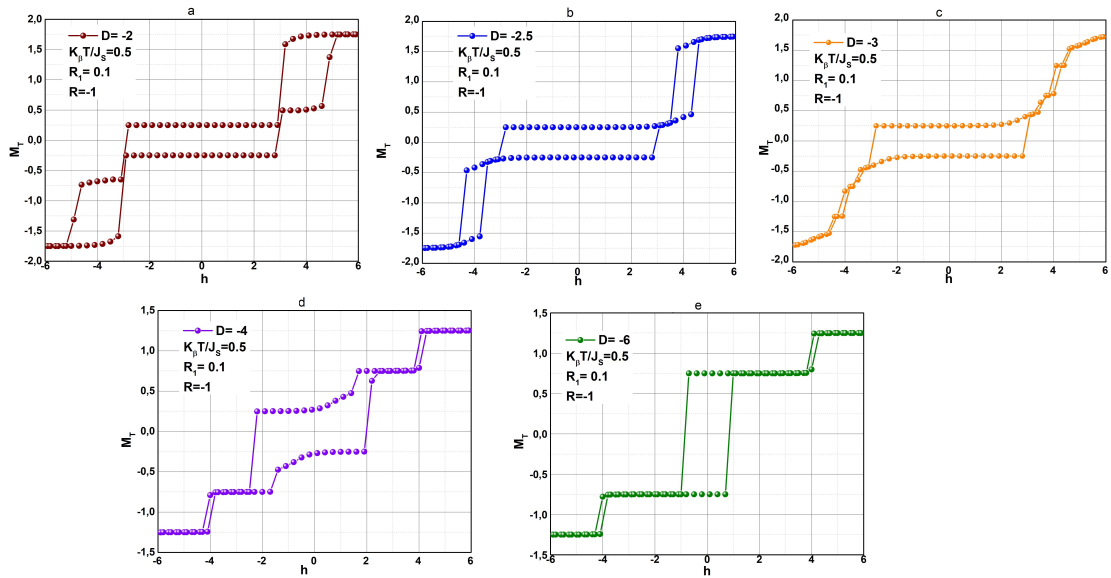


Figure III.23 – Cycles d’hystérésis à des valeurs fixées $R = -0.3$ et $R_1 = 0.1$ à basse température $T/J_s = 0.5$ et pour $D/J_s = -2.0$ (a); $D/J_s = -2.5$ (b); $D/J_s = -3.0$ (c); $D/J_s = -4.0$ (d); $D/J_s = -6.0$ (e) [109].

0.1 et $T/J_s = 0.5$. Dans la figure III.23(c), il est montré que le phénomène d'hystérésis à sept boucles a été trouvé si $D = -3.0$. Les courbes d'aimantation totale ont des comportements symétriques à la fois pour le champ magnétique externe positif et négatif $h = \pm 6$. Si on change les valeurs de D/J_s en ($D = -2.5, D = -2.0, D = -4.0, D = -6.0$), la topologie d'hystérésis disparaît et le nombre de boucles diminue à trois dans les figures III.23(a,b,d,e) [201, 209, 210].

3.3 Conclusion

Dans ce travail, Nous avons utilisé la méthode de Monte Carlo basée sur l'algorithme de Metropolis pour étudier les effets du champ cristallin longitudinal et de couplage d'échange intercouche sur les propriétés thermodynamiques et magnétiques, ainsi que sur le comportement du diagramme de phase dans les plans $(T, D/J_s)$ et (T, R) d'un nanofil d'Ising ferrimagnétique à structure hexagonale et à spins $(3/2, 2)$ composé de deux couches alternées. Nous avons constaté que ce système exhibe des transitions de phases du second ordre. Et si $h = 0$, il présente un point de compensation. Un résultat intéressant a été trouvé, lorsque nous appliquons un champ magnétique externe h , le système exhibe deux points de compensation si $(0.7 > D/J_s > -0.6)$, $R > -1.0$ et $h = 0.5$, et un seul point de compensation si $D/J_s = -0.5$, $R < -0.1$ et $h = 0.5$. Les effets du champ cristallin longitudinal et de la température sur les cycles d'hystérésis du système ont également été examinés. Nous avons trouvé le phénomène d'hystérésis à sept boucles où $D/J_s = -3.0$. De plus, le nombre de boucles diminue jusqu'à se stabiliser à trois boucles lorsque $D/J_s \neq -3.0$. Ce phénomène d'hystérésis de multi-boucles disparaît avec l'augmentation de la température et la diminution de D/J_s . Nos résultats sont en accord avec des études théoriques [204, 205, 209, 210] et expérimentales [207].

Chapitre IV

Étude des propriétés magnétiques dans les nanomatériaux de type nanofils et nanotubes à spins- $(3/2; 5/2)$ et à structure coeur-coquille (core-shell)

Introduction

À l'heure actuelle, les nanostructures magnétiques à structure cœur-coquille tels que les nanofils [211, 212], les nanoparticules [213, 214], les nanocristaux [215] et les nanofibres [216] font l'objet d'une attention accrue en raison de leurs propriétés magnétiques intéressantes et de leur large éventail de champ d'application en catalyse, en biologie, en chimie des matériaux et des capteurs. De nombreux chercheurs ont expérimentalement étudié ces matériaux dans le but de fabriquer des nanofils tels que $(Sn - C)$ [217], $(Ni(Fe_3O_4 - SiO_2))$ [218], $(Ni - Au)$ [219], $(ZnO - CdS)$ [220], $(NiCo_2O_4 - MnO_2)$ [221], etc... Théoriquement, de grands efforts ont été fournis pour comprendre les phénomènes critiques dans les nanofils cœur-coquille en utilisant plusieurs méthodes numériques telles que la simulation de Monte-Carlo (MCS) [222–225], la théorie du champ effectif avec corrélations (EFT) [226, 227], la théorie du champ moyen (MFT) [228], la méthode de Blume-Capel [229] et la théorie du champ effectif dynamique (DEFT) [230].

En effet, les propriétés magnétiques et thermodynamiques d'un nanofil d'Ising hexagonal

Chapter IV. Étude des propriétés magnétiques dans les nanomatériaux de type nanofils et nanotubes à spins-(3/2; 5/2) et à structure coeur-coquille (core-shell)

ferrimagnétique à spin (1, 3/2) et à morphologie coeur-coquille ont été récemment étudiées par A. Feraoun et al. [231] et D. Lv et al. [232] en utilisant la méthode de Monte Carlo (MCS). Les résultats obtenus ont montré l'existence des phénomènes de compensation et tricritique de la température de transition du système. N. Maaouni et al. [233] ont examiné les propriétés magnétiques d'une structure borophène coeur-coquille à l'aide de la même méthode. W. Wang et al. [234] ont étudiées les propriétés magnétiques d'un nano-îlot ferrimagnétique avec une structure coeur-coquille prismatique hexagonale. En utilisant la théorie (EFT) basée sur la technique de distribution de probabilité, Y. Kocakaplan et al. [183] ont examiné l'effet du champ magnétique transverse sur un nanofil d'Ising cylindrique à coeur-coquille et de spin 1. T. Kaneyoshi [235] a examiné les diagrammes de phases et les comportements magnétiques d'un nanofil d'Ising à coeur-coquille et à spins (1/2, 1/2) sous l'effet d'interaction d'échange, en utilisant l'EFT basée sur la technique de l'opérateur différentiel. Y. Benhouria et al. [236] ont discuté l'effet du champ électrique externe, du champ cristallin et des interactions d'échange pour un système nanotube ferriélectrique à spins (1/2, 3/2), en utilisant la simulation de monté carlo. Enfin, K. Htoutou et al. [182] ont étudié les diagrammes de phases, les propriétés magnétiques et thermodynamiques d'un nanofil d'Ising hexagonal ferrimagnétique à spins (3/2, 2) et à structure coeur-coquille en présence du champ cristallin longitudinal en utilisant la théorie du champ effectif en conjonction avec la technique de la distribution de la loi de probabilité. Parmi les résultats intéressants obtenus, on peut citer les phénomènes de compensation et tricritiques qui ont été trouvés sous certaines conditions du champ cristallin et du couplage d'échange ferrimagnétique.

Les comportements standards de l'aimantation thermique totale de type Q, P, N, S, et R ont été aussi enregistré. Enfin, le phénomène multiboucles d'hysteresis a été trouvé et discuté en détail en fonction de différents paramètres physiques des systèmes d'Ising. Il est à signaler que la coercivité et la rémanence des cycles d'hystérésis sont très importantes dans les supports d'enregistrement magnétique [237]. Les cycles d'hystérésis ont été également étudiés dans le cas des nanotubes d'Ising ferrimagnétiques hexagonaux à spins mixtes (1, 3/2) et à structure coeur-coquille en utilisant la Méthode MCS [238]. L'effet de l'anisotropie cristalline sur le comportement des cycles d'hystérésis d'un nano-îlot ferrimagnétique d'Ising à spins (1/2, 5/2) a été examiné par S. Yang et al. [239]. M. Gençaslan et al. [240] ont étudié les caractéristiques des cycles d'hystérésis magnétiques dynamiques (DMHL) des matériaux magnétiques à base moléculaire à spins mixtes (1/2, 1) en utilisant la méthode des probabilités de parcours (PPM). Quelques phénomènes inattendus ont été aussi observés sur les cycles d'hystérésis, tels que les comportements à trois, cinq, sept, neuf et onze boucles d'hystérésis sous plusieurs paramètres physiques.

Notre objectif dans ce chapitre est d'étudier dans la première section les propriétés thermodynamiques et magnétiques des nanofils d'Ising ferrimagnétiques hexagonaux à structure cœur-coquille et à spins mixtes $(3/2, 5/2)$.

Dans la deuxième section, nous allons étendre notre étude aux nanotubes ferrimagnétiques à même structure hexagonale cœur-coquille et à spins mixtes $(3/2, 5/2)$. Des résultats intéressants ont été obtenus en utilisant la simulation de Monte Carlo (MCS) basée sur l'algorithme de Métropolies.

1 Magnetic compensation and hysteresis loops in a cylindrical ferrimagnetic nanotube of a mixed spin-(3/2, 5/2) with core-shell structure (In Chinese Journal of Physics 2022)

1.1 Présentation du système étudié

Nous avons réalisé un nanotube Ising ferrimagnétique à structure hexagonale et à spin-(3/2, 5/2) composé de morphologie cœur-coquille. La section transversale et la structure 3D du système nanotube sont présentées dans la figure ??, l'Hamiltonien du nanotube hexagonal d'Ising ferrimagnétique peut être décrit dans IV.1.

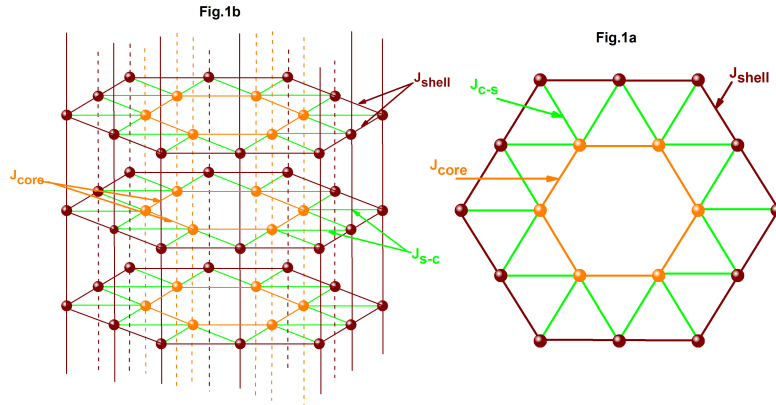


Figure IV.1 – Représentation schématique d'un nanotube d'Ising hexagonal à une structure cœur-coquille : (a) coupe transversale et (b) tridimensionnelle. Les sphères orange indiquent les atomes du cœur (spin- $\sigma = 5/2$), et les sphères brunes les atomes de la coquille (spin- $S = 3/2$).

L'Hamiltonien de notre système à spin mixte peut être décrit comme suit :

$$\mathcal{H} = -J_s \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - J_\sigma \sum_{\langle n,m \rangle} \sigma_n^z \sigma_m^z - J_{\text{int}} \sum_{\langle i,n \rangle} S_i^z \sigma_n^z - D_s \sum_{\langle i \rangle} ((S_i^z)^2) + D_c \sum_{\langle n \rangle} ((\sigma_n^z)^2) - h \left(\sum_{\langle i \rangle} S_i^z + \sum_{\langle n \rangle} \sigma_n^z \right) \quad (\text{IV.1})$$

Avec $\sigma = \pm 5/2$, et $S = \pm 3/2$, sont les composants de l'opérateur de spin de sous-réseaux du cœur et de la coquille, respectivement. J_σ , J_s et J_{int} désignent les couplages d'échange entre les deux atomes magnétiques les plus proches voisins au niveau des couches $\sigma - \sigma$ du cœur, des couches $S - S$ de la coquille et entre les couches $S - \sigma$ du cœur et de la coquille, respectivement. D_c et D_s dénotent les anisotropies cristallines longitudinales des sous-réseaux du cœur et de la coquille, respectivement. Et h représente le champ magnétique longitudinal externe.

Les simulations de Monte Carlo sont effectuées pour $N = (N_c + N_s) \times L$ spins où N représente le nombre total de spins dans la section transversale du nanotube, $N_c = 6$ désigne le nombre de spins dans le cœur, $N_s = 12$ désigne celui dans la coquille, $L = 100$ est la longueur du nanotube. Nous avons appliqué les conditions aux limites périodiques sur la direction (Oz) de l'épaisseur finie L et les conditions aux limites libres sur les directions (Ox) et (Oy).

1.2 Résultats et discussion

Dans cette section, nous avons étudié les effets du champ cristallin longitudinal du sous-réseau de la coquille D_s , des couplages d'échange (J_σ , et J_{int}) sur les propriétés magnétiques et thermodynamiques. Nous avons examiné la variation thermique de l'aimantation longitudinale totale, l'aimantation du cœur et de la coquille, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique, le comportement de compensation, ainsi que les cycles d'hystérésis d'un nanotube d'Ising ferrimagnétique à spin mixte (3/2; 5/2) et à structure hexagonale cœur-coquille. Pour simplifier les résultats, nous prenons $J_c = 1$ et les couplage d'échange réduites sont définies par $R = J_{int}/J_c$ et $R_1 = J_\sigma/J_c$.

1.2.1 Propriétés magnétiques et thermodynamiques

Dans les figures IV.2(a-d), nous examinons la variation thermique des aimantations totale M_T et partielle (de la coquille M_{sh} du cœur M_c), la susceptibilité magnétique et la chaleur spécifique pour des valeurs négatives et positives du champ cristallin longitudinal ($D_s = -1.5, -1.0, 0.0, 1.2, 2.0, 4.0, 9.0, 12.0$), lorsque $D_c = -0.5$, $h = -0.0$, $R = -0.5$ et $R_1 = 0.7$. L'effet de D_{sh} sur les deux aimantations partielles a été étudié sur la figure IV.2(a). Nous pouvons observer que les deux aimantations ont disparu à la température critique $T_c = 15.0$ est la température de transition entre la phase ferrimagnétique (région à basse température) et la phase paramagnétique (région à haute température). De plus, pour $T = 0.0$ on peut remarquer que $M_c = 2.5$ et $M_{sh} = -1.5$ qui présentent la valeur de saturation ($M_T = -0.16$) définie par l'équation suivante $M_T = ((6 * M_c + 12 * M_{sh}) / 18) = ((6 * 2.5 + 12 * -1.5) / 18) = -0.16$. Sur la figure IV.2(b), la courbe de M_T présente deux zéros successifs. Le

Chapter IV. Étude des propriétés magnétiques dans les nanomatériaux de type nanofils et nanotubes à spins-(3/2; 5/2) et à structure coeur-coquille (core-shell)

premier correspond à la température de compensation T_{com} le second correspond à la température critique T_c . T_{com} varie proportionnellement avec D_s mais T_c reste presque invariable. Remarquablement, le M_T du système présente un comportement de type-N selon la théorie de Néel. Les mêmes résultats ont été obtenus pour la susceptibilité totale χ_T et la chaleur spécifique C_v , respectivement dans les Figures IV.2(c-d). Les courbes sont composées d'un pic unique au voisinage du T_c . Par conséquent, ce pic reste presque invariable avec la température lorsque le champ cristallin longitudinal D_s augmente. Ces comportements sont comparés avec les résultats théoriques suivants [222–225].

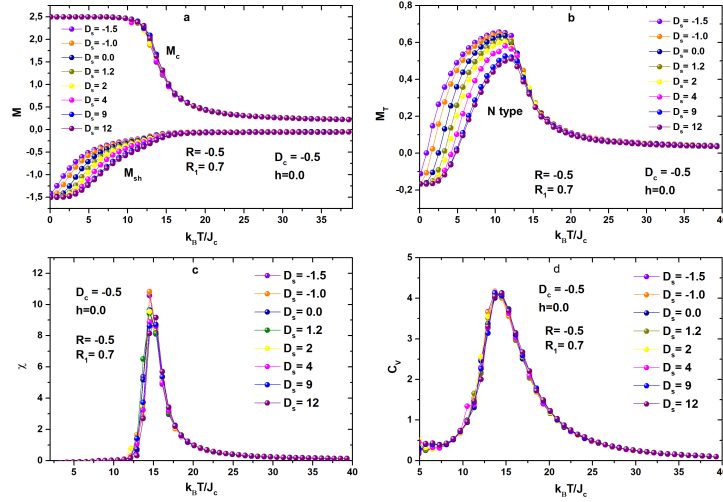


Figure IV.2 – Variation thermique de l'aimantation totale M_T (a), des aimantations partielles M_s et M_c (b), de la susceptibilité totale magnétique χ (c), et de la chaleur spécifique (d) en absence du champ magnétique externe pour les différentes valeurs sélectionnées de ($D_s = -1.5, -1.0, 0.0, 1.2, 2.0, 4.0, 9.0, 12.0$), lorsque $M_T = -0.5$, $h = 0.0$, $R = -0.5$ et $R_1 = 0.7$.

Les figures IV.3(a-d) montrent les variations thermiques des aimantations de la coquille et du cœur, de l'aimantation totale M_T , de la susceptibilité magnétique et de la chaleur spécifique en fonction de différentes valeurs du couplage d'échange ($R = -0.5, -1.0, -2.0, -3.0$), lorsque $R_1 = 0.7$, $R = -0.5$, $D_{sh} = -0.5$, et $h = -0.0$. On constate que les courbes de M_{sh} et M_c disparaissent à la température critique T_c . Nous remarquons que l'effet de l'interaction d'échange R sur les deux aimantations est clair comme l'indique la figure 3(a). Dans la figure IV.3(b), l'aimantation totale présente le comportement de compensation de type-N. De plus, les températures de compensation T_{com} critique T_c augmentent lorsque R diminue. Comme mentionné ci-dessus, la courbe de la susceptibilité totale χ_T tracée sur la figure IV.3(c), montre

IV.1 Magnetic compensation and hysteresis loops in a cylindrical ferrimagnetic nanotube of a mixed spin-(3/2, 5/2) with core-shell structure (In Chinese Journal of Physics 2022)

la susceptibilité typique de notre système avec un seul pic. Pour ces figures, si la valeur de R augmente, les pics se déplacent vers la droite. Les courbes de la chaleur spécifique C_v ont été présentées sur la figure IV.3(d), phénomène de double pic observé si ($R = -1.0$), alors qu'un pic unique est trouvé si ($R \neq -1.0$). Ces comportements sont comparés aux résultats théoriques suivants [222–225].

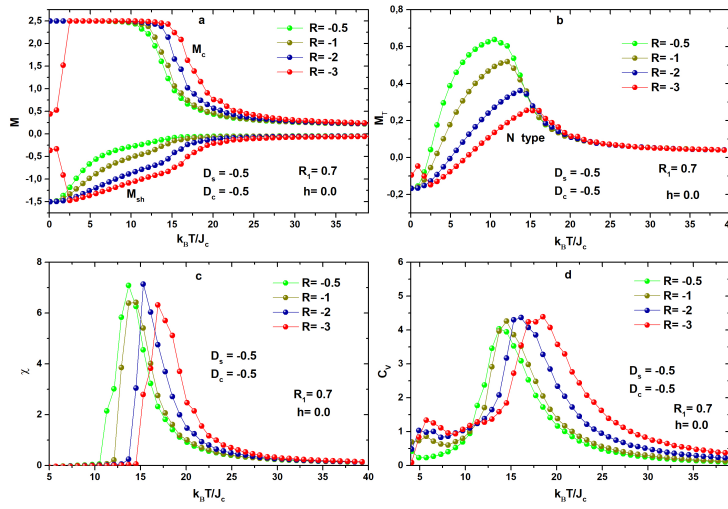


Figure IV.3 – Variation thermique de l'aimantation totale M_T (a), les aimantations partielles M_s et M_c (b), la susceptibilité totale magnétique χ (c), et la chaleur spécifique (d) en absence du champ magnétique externe pour les différentes valeurs sélectionnées de ($R = -0.5, -1.0, -2.0, -3.0$), lorsque $R_1 = 0.7$, $R = -0.5$, $D_{sh} = -0.5$, et $h = 0.0$.

Les figures IV.4(a-d) présentent la variation thermique de l'aimantation totale M_T , ainsi que des aimantations de la coquille et du cœur M_{sh} et M_c , de la susceptibilité magnétique et de la chaleur spécifique pour différentes valeurs du couplage d'échange du cœur $R_1 = 0.1, 0.7, 1.0, 1.6, 2.0, 3.0, 4.0, 6.0, 8.0$, lorsque $R = -0.5$, $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, et $h = -0.0$. Nous observons que les courbes de M_{sh} et M_c disparaissent à la température critique T_c sur la figure IV.4(a). L'effet de R_1 sur M_{sh} est plus fort que l'effet sur M_c pour ($0.1 \leq R_1 \leq 4.0$). Dans la figure IV.4(b), l'aimantation totale présente plusieurs formes standard telles que le comportement de type-N dans l'intervalle ($0.1 \leq R_1 \leq 4.0$), le comportement de type-Q pour ($R_1 = 6.0$) et le comportement de type-S pour ($R_1 = 8.0$). De plus, T_{com} a été détectés lorsque ($0.1 \leq R_1 \leq 6.0$). Nous avons mentionné que, T_{com} et T_c varient de façon monotone avec R_1 comme indiqué dans les Figures IV.4(a-b). Alors que, comme indiqué dans les Figures IV.4(a-b), elles diminuent en fonction de R_1 . Les courbes de la susceptibilité totale χ_T et de la

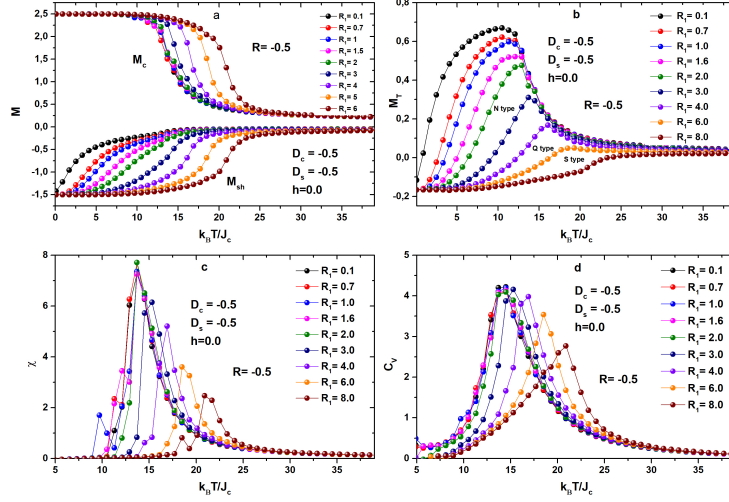


Figure IV.4 – Variation thermique de l'aimantation totale M_T (a), les aimantations partielles M_s et M_c (b), la susceptibilité totale magnétique χ (c), et la chaleur spécifique (d) en absence du champ magnétique externe pour les différentes valeurs sélectionnées de $R_1 = 0.1, 0.7, 1.0, 1.6, 2.0, 3.0, 4.0, 6.0, 8.0$), lorsque $R = -0.5$, $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, et $h = 0.0$.

chaleur spécifique C_v , respectivement tracées dans les Figures IV.4(c-d), qui montre également la susceptibilité typique du nanotube hexagonal ferrimagnétique d'Ising caractérisée par un seul pic, et nous pouvons voir sur ces figures que l'augmentation de la valeur de R_1 entraîne le déplacement du pic vers la droite. Il est intéressant de noter que T_c reste presque invariable pour $(0.1 \leq R_1 \leq 2.0)$, et augmente progressivement pour $(0.1 \leq R_1 \leq 8.0)$. Ces comportements sont comparés avec les résultats théoriques suivants [222–225].

1.2.2 Diagrammes de phase

Dans la figure IV.5, nous avons étudié les diagrammes de phase dans le plan $(T; D_{sh})$ pour les valeurs fixes de $h = 0.0$, $D_c = -0.5$ et $R_1 = 0.7$. Le diagramme de phase présente la variation des températures critique et de compensation fonction du champ cristallin longitudinal de la coquille D_{sh} . Si nous augmentons D_{sh} , à $T_c = 14.55$ température critique reste presque invariable mais la température de compensation T_{com} augmente exponentiellement, De plus, ce diagramme de phase présente la transition de phase de deuxième ordre à haute température. Nous remarquons également que l'effet du champ cristallin longitudinal du sous-réseau de la coquille D_{sh} sur T_{com} est considérable par rapport à l'effet du T_c .

IV.1 Magnetic compensation and hysteresis loops in a cylindrical ferrimagnetic nanotube of a mixed spin-(3/2, 5/2) with core-shell structure (In Chinese Journal of Physics 2022)

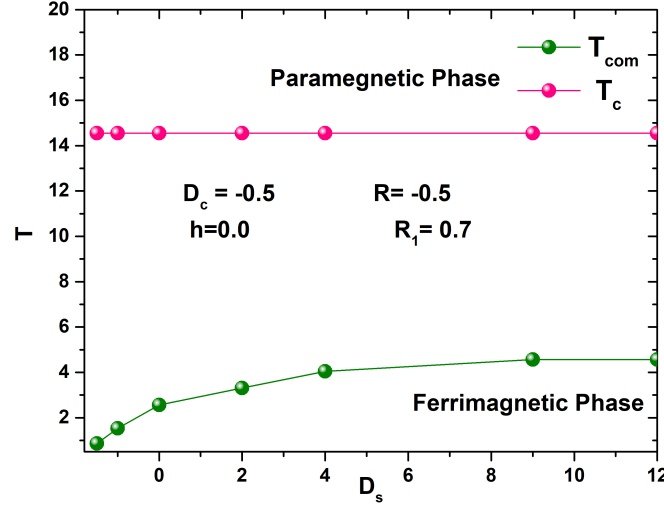


Figure IV.5 – Diagramme de phase dans le plan $(T; D_{sh})$ pour les valeurs fixes de $h = 0.0$, $D_c = -0.5$ et $R_1 = 0.7$.

Les effets de l'interaction d'échange R sur le diagramme de phase dans le plan $(T; R)$ ont été étudiés sur la figure IV.6 avec les valeurs fixes de $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, $R_1 = 0.7$ et $h = -0.0$. La température de compensation T_{com} été trouvée pour différentes valeurs de R . Nous mentionnons que le système ne présente que les transitions de phase de deuxième ordre. De plus, T_c et T_{com} diminuent avec l'augmentation de R . La figure IV.7, montre l'effet de l'interaction d'échange R_1 sur la température critique et de compensation. Nous remarquons que le système présente une transition de phase de deuxième ordre à haute température pour ($R_1 > 0.0$). De plus, $T_{com} = 13,75$ reste presque constant dans ($0.0 \leq R_1 \leq 2.0$), et augmente progressivement dans ($2.0 \leq R_1 \leq 9.0$). Nous voyons également que la température de compensation augmente dans ($0.0 \leq R_1 \leq 6.0$), ce qui explique que cette température est bornée par les petites valeurs des interactions d'échange. D'autre part, les deux températures T_{com} et T_c augmentent avec l'augmentation de R_1 et elles se croisent à un point critique du couplage d'échange $R_1 = 6.2$.

1.2.3 Cycles d'hystérésis

Dans cette dernière partie, nous avons étudié dans les figures 8-10, les effets du champ cristallin longitudinal de la coquille D_{sh} , de l'interaction d'échange R , et de la température T sur le comportement des cycles d'hystérésis du système. Dans les figures IV.8(a-h), nous avons présenté les cycles d'hystérésis du système total, et des sous-réseaux (cœur et coquille) pour des

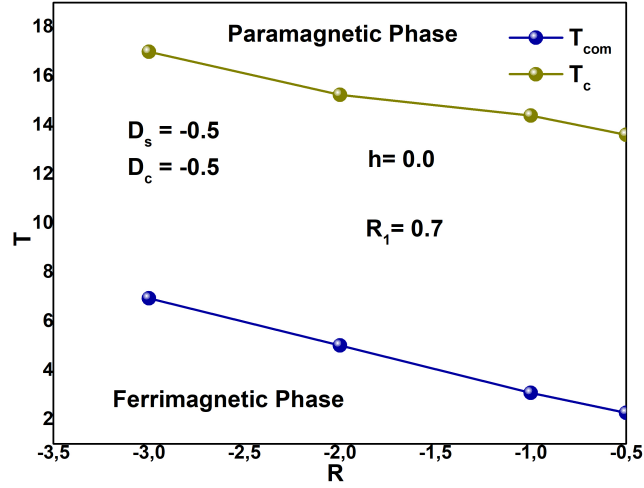


Figure IV.6 – Diagramme de phase dans le plan $(T; D_{sh})$ pour les valeurs fixes de $h = 0.0$, $D_c = -0.5$ et $R_1 = 0.7$.

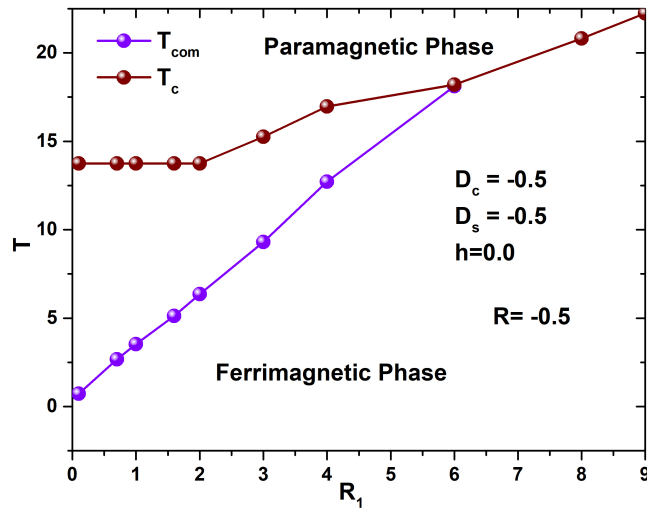


Figure IV.7 – Diagramme de phase dans le plan $(T; D_{sh})$ pour les valeurs fixes de $h = 0.0$, $D_c = -0.5$ et $R_1 = 0.7$.

IV.1 Magnetic compensation and hysteresis loops in a cylindrical ferrimagnetic nanotube of a mixed spin-(3/2, 5/2) with core-shell structure (In Chinese Journal of Physics 2022)

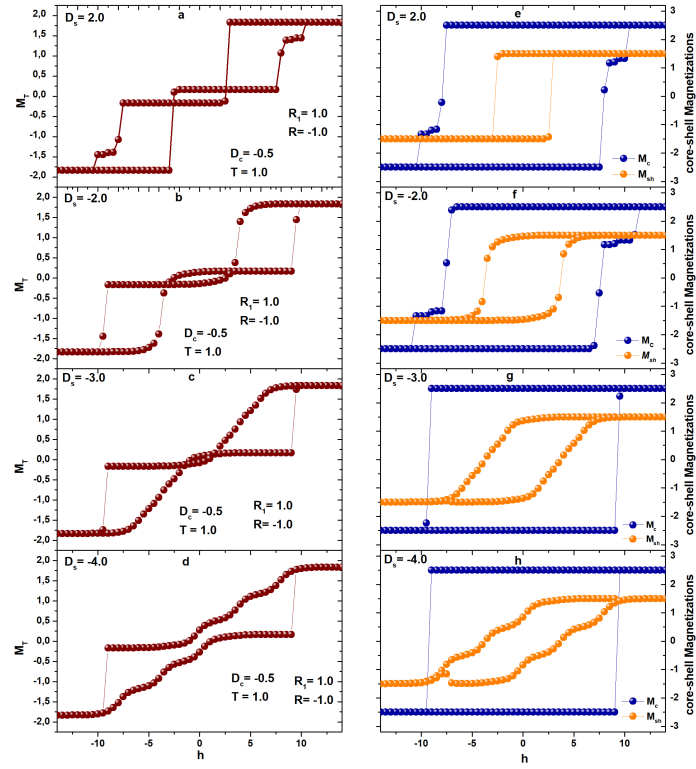


Figure IV.8 – Cycles d'hystérésis à pour des valeurs fixes $D_c = -0.5$, $R = -1.0$, $R_1 = 1.0$, $T = 1.0$ et lorsque $D_{sh} = 2.0, -2, 0, -3, 0, -4, 0$.

Chapter IV. Étude des propriétés magnétiques dans les nanomatériaux de type nanofils et nanotubes à spins-(3/2; 5/2) et à structure coeur-coquille (core-shell)

valeurs fixes $D_c = -0.5$, $R = -1.0$, $R_1 = 1.0$, $T = 1.0$ et lorsque $D_{sh} = 2.0, -2, 0, -3, 0, -4, 0$). Nous observons que les courbes d'aimantation sont symétriques pour les valeurs positives et négatives du champ magnétique externe $h = \pm 14.0$, le système total présente le phénomène à trois boucles d'hystérésis lorsque $(-3.0 \leq D_{sh} \leq 2.0)$ sur les figures 8(a c), tandis que les deux cycles sous-réseaux cœur et coquille présentent une seule boucle sur les figures 8(e-h). Nous notons également que les boucles d'hystérésis du cœur sont plus grandes que celles de la coquille. De plus, ce phénomène intéressant disparaît avec l'augmentation du champ cristallin longitudinal de la coquille D_{sh} . En conclusion, l'influence de D_{sh} sur les cycles d'hystérésis du système total ainsi que de cœur et de la coquille est très importante que celle de D_c . Les figures

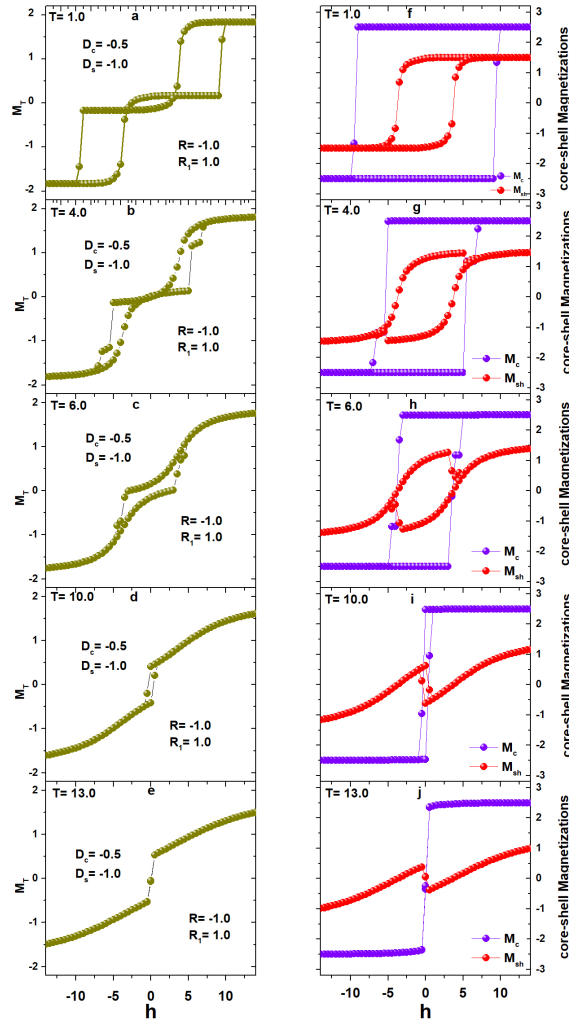


Figure IV.9 – Cycles d'hystérésis à pour différentes valeurs de $T = 1.0, 4.0, 6.0, 10.0, 13.0$ avec des valeurs fixes $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -1.0$, $R = -1.0$ et $R_1 = 1.0$.

IV.1 Magnetic compensation and hysteresis loops in a cylindrical ferrimagnetic nanotube of a mixed spin-(3/2, 5/2) with core-shell structure (In Chinese Journal of Physics 2022)

IV.8(a-i) montrent les effets de la température sur les comportements des cycles d'hystérésis du système total, du cœur et de la coquille avec différentes valeurs de $T = 1.0, 4.0, 6.0, 10.0, 13.0$ avec des valeurs fixes $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -1.0$, $R = -1.0$ et $R_1 = 1.0$. Nous voyons que le système total présente le phénomène à trois boucles d'hystérésis à basse température, et les courbes d'aimantation totale sont symétriques pour les valeurs positives et négatives du champ magnétique externe $h = \pm 14.0$. Alors que les sous-réseaux (cœur et la coquille) présentent une seule boucle, et les boucles d'hystérésis du cœur sont plus grandes que celles de la coquille. En augmentant les valeurs de température jusqu'à $T = 13.0$, le nombre de boucles d'hystérésis disparaît, le champ coercitif augmente, et les boucles d'hystérésis des sous-réseaux du cœur et de la coquille diminuent. De plus, à haute température, les courbes d'aimantation totale et de cœur-coquille présentent un comportement de type-S. Ces résultats similaires ont été observés dans les études des systèmes Ising tels que nanofil hexagonal, nanoisland hexagonal, nanofil cubique, nanocube, nano-graphène et matériaux magnétiques à base molécules [222–230]. Enfin,

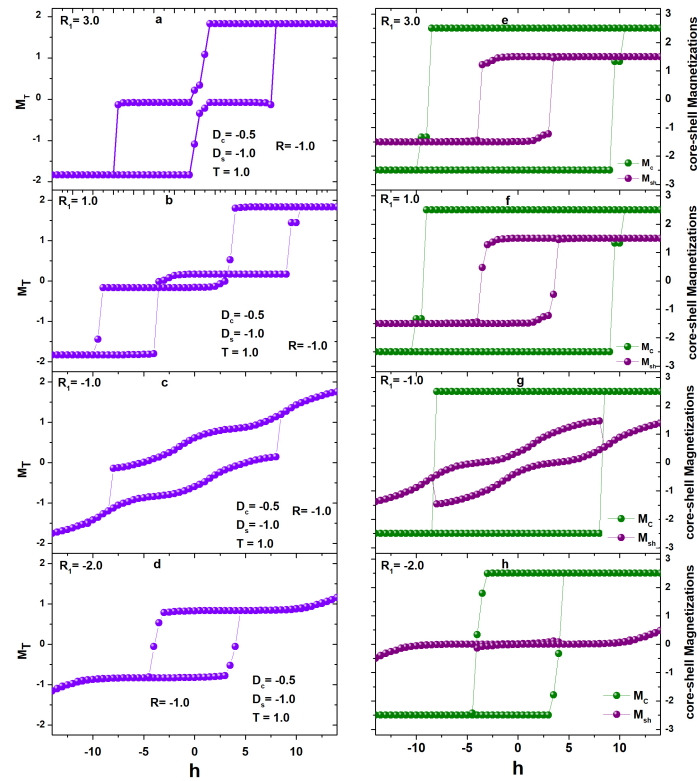


Figure IV.10 – Cycles d'hystérésis à pour des valeurs sélectionnées de $R_1 = 3.0, 1.0, -1.0, -2.0$ et avec les valeurs fixes de $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -1.0$, $R = -1.0$ et $T = 1.0$.

les figures IV.10(a-h) illustrent les effets de l'interaction d'échange R_1 sur les cycles d'hystérésis du système total, des sous-réseaux du coeur et de la coquille pour des valeurs sélectionnées de $R_1 = 3.0, 1.0, -1.0, -2.0$ et avec les valeurs fixes de $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -1.0$, $R = -1.0$ et $T = 1.0$. Nous pouvons observer que les courbes d'aimantation totale sont symétriques pour des valeurs de champ magnétique positives et négatives, et présentent le phénomène à trois boucles d'hystérésis pour l'interaction d'échange $R_1 = 1.0$. Ce comportement à multi boucles d'hystérésis est principalement dus à la compétition entre les interactions d'échange coeur-coquille, le champ cristallin longitudinal D_{sh} et le champ magnétique externe appliqué au système. Cependant, en diminuant les valeurs de R_1 jusqu'à $R_1 = -2.0$. De plus, la boucle d'hystérésis unique du sous-réseau central devient plus étroite. D'autre part, la boucle d'hystérésis du sous-réseau de la coquille a disparu.

1.3 Conclusion

Dans ce papier, notre objectif principal consistait à l'étude des effets du champ longitudinal cristallin D_s , des couplages d'échange (J_σ , et J_{int}) sur les propriétés magnétiques et thermodynamiques telles que l'aimantation longitudinale totale, l'aimantation du coeur et de la coquille, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique totale, les diagrammes de phase avec la variation de température de compensation et celle critique ainsi que les comportements de cycle d'hystérésis du nanotube ferrimagnétique à une structure coeur-coquille en utilisant la simulation de Monte Carlo. Nos résultats importants contiennent plusieurs phénomènes magnétiques, critiques et hystérétiques, le système exhibe une transition de phases de second ordre et peut présenter un comportement de compensation sous certains paramètres physiques. L'aimantation totale du système présente une forme standard de comportement du type- N , $-Q$ et $-S$ selon la théorie de Néel [116]. De plus, les cycles d'hystérésis du système présentent le phénomène d'hystérésis à trois boucles pour l'aimantation totale et des boucles simples pour les aimantations du coeur et de la coquille sous certaines valeurs de D_s , T et R . Si nous diminuons la température du système le nombre des boucles également diminue. Nos résultats sont en accord avec les études théoriques et expérimentales [241, 242].

2 Hysteresis loops and compensation behavior of ferrimagnetic mixed spin (3/2; 5/2) hexagonal Ising nanowire with core-shell structure: Monte Carlo Simulation (In Journal of Cluster Science 2022)

2.1 Présentation du système étudié

Nous considérons un nanofil d'Ising ferrimagnétique hexagonal à structure cœur de spin- $S = 3/2$ entouré d'une coquille de spin- $\sigma = 5/2$, comme représentée dans la :

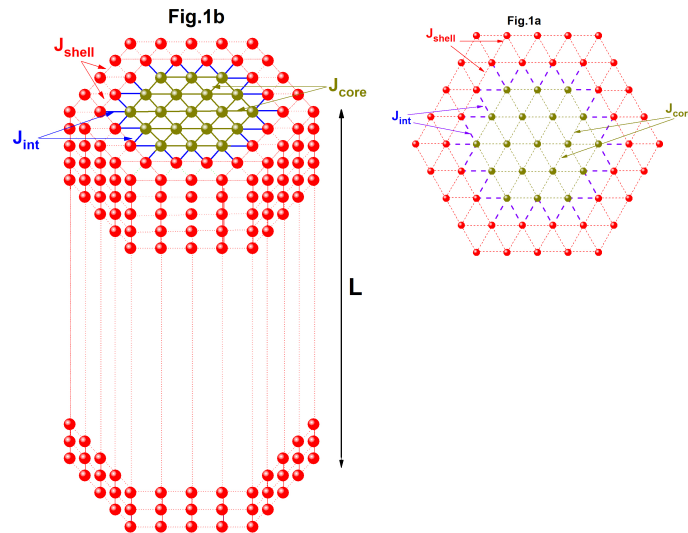


Figure IV.11 – Représentation schématique d'un nanofil d'Ising hexagonal à une structure cœur-coquille : (a) coupe transversale et (b) tridimensionnelle. Les sphères vertes indiquent les atomes du cœur (spin- $\sigma = 5/2$), et les sphères rouges les atomes de la coquille (spin- $S = 3/2$).

où $S = \pm 3/2, \pm 1/2$ et $\sigma = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ sont les composantes de spin de sous-réseaux de la coquille et du cœur, respectivement. J_s , J_σ et J_{int} représentent les constantes de couplage d'échange entre les deux atomes magnétiques les plus proches voisins au niveau des couches $S - S$ du cœur, des couches $\sigma - \sigma$ de la coquille et entre les couches $S - \sigma$ du cœur et de la coquille, respectivement. D_c et D_s dénotent des anisotropies cristallines longitudinales des sous-réseaux du cœur et de la coquille, respectivement. Et h représente le champ magnétique externe.

Chapter IV. Étude des propriétés magnétiques dans les nanomatériaux de type nanofils et nanotubes à spins-(3/2; 5/2) et à structure coeur-coquille (core-shell)

On emploie la méthode de Monte-Carlo. De plus, les simulations de Monte Carlo sont effectuées pour $N = (N_c + N_s) \times L$ spins, N est le nombre total de spins dans la section transversale du nanofil, $N_c = 19$ désigne le nombre de spins dans le cœur, $N_s = 43$ désigne le nombre de spins dans la coquille, $L = 100$ est la longueur du nanofil. Nous avons appliqué les conditions aux limites périodiques sur la direction (Oz) de l'épaisseur finie L et les conditions aux limites libres sur les directions (Ox) et (Oy). Nous avons utilisé la même l'équation de la section 1 dans le chapitre 3 [III.2](#), [III.3](#) et [III.4](#) pour déterminer les propriétés magnétiques et thermodynamique du système.

Nous avons utilisé les mêmes équations de la section 1 dans le chapitre 3 [III.2](#), [III.3](#) et [III.4](#) pour déterminer les propriétés magnétiques et thermodynamiques du système.

2.2 Résumé de la publication

Dans cette publication, nous avons appliqué la méthode de Monte-Carlo pour étudier les effets du champ cristallin longitudinal de la coquille D_s (shell), les couplages d'échanges (R et R_1) sur les propriétés thermodynamiques et magnétiques du système telles que les aimantations totale M_T et partielles du coeur-coquille M_s et M_c , la susceptibilité totale χ , la chaleur spécifique totale C_v ainsi que les comportements du diagramme de phase dans les plans ($T; R$), ($T; R_1$) et ($T; D_s$) d'un nanofil d'Ising ferrimagnétique à une structure hexagonale et à spins-(3/2; 5/2) composé de coeur-coquille. Nous avons également examiné l'influence du champ cristallin longitudinal de coquille D_s , de la température T et du couplage d'échange R sur les cycles d'hystérésis avec différents paramètres fixés. De plus, les résultats montrent que les températures de compensation et critiques ont été trouvées avec des paramètres précis et l'aimantation totale M_T du système présente une forme standard de type- N présentée par [\[116\]](#). Le système exhibe donc une transition de phase de second ordre. Nous avons également obtenu le phénomène d'hystérésis à trois boucles dans le cas où $D_s = -2.0$, $D_c = -2.0$, $J_{int} = -1.0$, et $J_c = 1.0$ à $T = 2.0$, mais si nous changeons ces paramètres le phénomène d'hystérésis à multi-boucles disparaît. Nous avons également observé que les boucles d'hystérésis disparaissaient définitivement de façon remarquable lorsque la température critique est grande et importante.

Les résultats que nous avons obtenus signifient que ce nanofil est plus performant et donc pourrait être utilisé dans plusieurs domaines physiques tels que les nanofils semi-conducteurs [\[243, 244\]](#), les supraconducteurs [\[245\]](#), les applications optoélectroniques [\[243\]](#)... Ces résultats sont en accord avec les études théoriques et expérimentales [\[246–248\]](#).

Conclusion générale

Les nanomatériaux de type nanofils et nanotubes ferrimagnétiques connaissent de larges applications dans les technologies modernes grâce à la richesse en phénomènes physiques et spécifiquement magnétiques qui en découlent, l'investigation des propriétés magnétiques que peuvent exhiber ces structures nanométriques, plus particulièrement, la description des aimantations et leurs comportements sous l'effet thermique, ouvre la voie de l'amélioration, l'illustration et prédiction des phénomènes importants dans le développement d'une nouvelle génération de dispositifs miniaturisés et plus performants surtout dans les technologies de stockage, ceci nous a poussés et nous a motivé à explorer encore plus et de se mettre face aux défis de mieux comprendre ces structures ferrimagnétiques à spins mixtes, précisément d'explorer, des phénomènes de compensation, les transitions de phases et leurs ordres ainsi que les types des aimantations manifestées par ces systèmes.

Dans un premier temps, nous avons évoqué des généralités sur le magnétisme ainsi que les propriétés magnétiques des nanomatériaux telles que les nanofils et les nanotubes et leurs importances dans le domaine biomédical, le stockage de données et les capteurs magnétiques [2–4, 7, 8]. Ces nanomatériaux magnétiques tirent cette importance de leurs structures et morphologies, à ce stade nous devons mentionner la particularité des phénomènes physiques résultante du passage d'un matériau massif à un nanomatériau où l'effet du volume devient négligeable par rapport à celui de surface [8]. Par la suite, nous avons donné une description du modèle d'Ising sur lequel on s'est basé dans notre travail [20], ainsi que les principes de la méthode de Monte-Carlo [21]. Il convient de souligner que les principes fondamentaux de la méthode de Monte-Carlo ont été approchés, depuis le principe d'application jusqu'à l'équilibre des calculs de mesure, en passant par la mise en œuvre de l'algorithme de Metropolis [21].

Conclusion générale

Nous avons répartis le travail en deux volets, le premier a été consacré à l'étude des propriétés magnétiques et thermodynamiques telles que les aimantations, la susceptibilité, la chaleur spécifique, l'énergie interne, les digrammes de phase et le comportement des cycles d'hystérésis d'un nanofil ferrimagnétique à spins mixtes $(1/2; 1)$, $(3/2; 5/2)$ et $(3/2; 2)$, composé de deux couches alternés à structure hexagonale dans le cadre du modèle d'Ising. Le deuxième a été destiné à l'étude des nanofils et nanotubes ferrimagnétiques à spins mixtes $(3/2; 5/2)$ et à structure hexagonale de forme cœur-coquille, à savoir, dans l'objectif de mettre en relief ces propriétés nous avons exploité dans tous nos travaux la méthode de Monte-Carlo, basée sur l'algorithme de Metropolis. L'objets principale de nos résultats a été d'illustrer comment se manifestent les propriétés magnétiques globales des nanofils et des nanotubes sous certaines conditions de paramètres bien déterminées, soit sous l'effet thermique considéré comme facteur extrinsèque, le champ magnétique externe et l'interaction d'échange intra-couches ainsi que les effets des différents facteurs intrinsèques comme la constante d'anisotropie cristallin, les interactions d'échange inter-couches.

Nous résumons les principaux résultats et les perspectives possibles de notre travail ainsi : le premier volet s'étale sur trois sections; la première section est une étude des nanofils à spins mixtes $(1/2; 1)$ où nous avons évoqué en détail l'influence du champ cristallin longitudinal, du couplage d'échange inter-couches et intra-couches et de la température sur les boucles d'hystérésis. Comme résultats remarquables le système ferrimagnétique en question ne présente pas un comportement de compensation et subit une transition de phase de second ordre. Nous avons observé différents types d'aimantations caractéristiques d'un système ferrimagnétique tels que type-P, Q, et R. Un autre résultat important se manifeste dans l'observation du phénomène de trois boucles d'hystérésis à basse température, le nombre des boucles diminue avec l'augmentation de la température et du champ cristallin longitudinal. Nos résultats obtenus sont en bon accord avec ceux trouvé par L. B. Drissi et al [176].

Par ailleurs, nous avons mis en jeu l'influence du couplage d'échange d'inter-couches et d'intra-couches aussi du champ cristallin longitudinal sur les diagrammes de phases ainsi que sur les propriétés thermodynamiques. Les comportements des boucles d'hystérésis magnétiques ont été également étudié en fonction de certains paramètres physiques, pour découvrir plus de propriétés magnétiques en utilisant la même démarche citée qu'auparavant, essentiellement concernant le nanofil à spins mixtes $(3/2; 5/2)$, Les résultats numériques ont montré la présence d'un comportement de double compensation ainsi qu'une transition de phase de premier et de second ordre. D'autre part nous avons remarqué que ces systèmes présentent un phénomène de sept boucles d'hystérésis à basse température et pour des valeurs négatives du champ cristallin longitudinal. Nos résultats sont cohérents avec d'autres études théoriques [249–253] et résultats

expérimentaux [254, 255].

Dans la troisième section, nous avons choisi la combinaison de spins mixtes à $(3/2; 2)$ pour étudié l'effet de l'anisotropie longitudinal cristallin, du champ longitudinal externe h et des constantes d'interaction d'échange sur le comportement magnétique de système. Nous avons constaté que le système subit également une température de double compensation en fonction des paramètres choisis. D'un autre côté, nous avons montré que le système est très riche en différentes d'aimantations soit de type-N, type-W et type-S. Nous avons trouvé que le système présente un phénomène de sept boucles d'hystérésis à basse température et pour des valeurs négatives sélectionnées du champ longitudinal cristallin. Nous avons attribué ces phénomènes à la structure, à la nature de notre système et aux effets que nous avons mis en jeu. Nos résultats sont obtenus par des études théoriques [208, 210, 247, 256] et des résultats expérimentaux [207].

Ensuite le deuxième volet (dernier chapitre) constitué par deux sections, la première section a été consacrée à une étude des effets de l'anisotropie cristalline présente dans la coquille, l'interaction d'échange inter-couches et intra-couches sur les différentes grandeurs magnétiques et thermodynamiques, ainsi que les comportements des diagrammes de phases, nous avons également examiné l'influence de D_s et de R ainsi que T sur les boucles d'hystérésis avec différents paramètres fixés. Les résultats montrent que la température de compensation a été trouvée par ajustement et choix particulier des paramètres du système qui également subit une transition de phase de premier et de second ordre. Ainsi, nous avons obtenu un phénomène important de trois boucles d'hystérésis. Ces résultats obtenus prouvent que potentiellement ce système nanofil est plus performant. Ce nanofil peuvent servir dans plusieurs applications technologiques telles que les nanofils semi-conducteurs [241, 242], les supraconducteurs [243], les applications optoélectroniques [244]. Ces résultats sont en accord avec les études théoriques et les résultats expérimentaux [245–247].

Dans la deuxième section, nous avons étudié les effets de l'anisotropie longitudinale cristalline de la coquille, les interactions d'échanges inter-couches et intra-couches et sur les diagrammes de phases et les aimantations, spécifiquement, sur l'aimantation du cœur et l'aimantation de la coquille. Nous avons donc visé dans notre étude, le comportement des boucles d'hystérésis sous l'influence du D_{sh} , de T et de R . Nos résultats indiquent la richesse de ces systèmes magnétiques en phénomènes diversifiés, au fait, le système subit une transition de phases de second ordre et peut présenter un comportement de compensation sous certaines valeurs des paramètres physiques. De plus, l'aimantation totale sous l'action d'un champ externe donnent lieu au phénomène de trois boucles d'hystérésis.

Enfin, ce travail a montré la possibilité de contrôler et prédire beaucoup de résultats magnétiques importants selon le choix de combinaison de spin mixte, en fait les propriétés changent

Conclusion générale

en passant de $(1/2; 1)$ à $(3/2; 5/2)$ ou $(3/2; 2)$, notamment, les résultats obtenus peuvent servir de point de comparaison pour les calculs théoriques sur d'autres types de systèmes.

En guise de perspectives et pour compléter nos recherches, d'autres formes d'assemblages à spin mixte dans un nanofil où nanotube pourrait être modélisé par la méthode de Monte-Carlo. Ainsi, d'autres propriétés telles que l'effet de taille des nanomatériaux, l'influence du temps où les propriétés magnétiques dynamiques pourraient être discutées dans des travaux au futur. En outre, nous envisageons introduire d'autres termes dans les Hamiltoniens, afin d'explorer d'autres propriétés atypiques dues aux nanostructures. Enfin, nous souhaitons utiliser autres modèles et méthodes de calcul comme *ab-initio* et méthode du champ effectif EFT avec la technique de la loi de distribution de probabilité et comparer ceux-ci avec nos résultats.

Bibliographie

- [1] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials, Cambridge University Press, (2009). [1](#), [2](#), [9](#), [11](#), [12](#), [13](#), [14](#), [18](#), [21](#), [22](#), [23](#), [37](#), [40](#), [41](#), [42](#), [44](#), [45](#), [46](#), [47](#)
- [2] B. Zhang. Physical Fundamentals of Nanomaterials, (2018). [1](#), [2](#), [16](#), [18](#), [143](#)
- [3] G. Guisbiers, S. Mejia-Rosales et D. F. Leonard, Nanomaterial properties: size and shape dependencies, J. Nanomater, 2012 (2012) 1-2. [2](#), [10](#), [143](#)
- [4] A. Koçak et B. Karasu, General evaluations of nanoparticles. El-Cezeri Fen ve Mwühendislik Derg, 5 (2018) 191-236. [2](#), [10](#), [143](#)
- [5] D. Shi, Z. Guo et N. Bedford. Nanomaterials and Devices, (2014). [2](#), [3](#), [10](#)
- [6] ISO/TS 229, 80004-1:2010, Nanotechnology-vocabulary-part 1: core terms. Geneva, Switzerland: International Organization for Standardization, (2010). [2](#)
- [7] J. Arbiol et Q. Xiong. Semiconductor Nanowires Materials, Synthesis, Characterization and Applications, (2015). [3](#), [5](#), [143](#)
- [8] S. Prabha, G. Arya, R. Chandra, B. Ahmed et S. Nimesh. Cells Nanomed. Biotechnol, 44 (2016) 83-91. [3](#), [10](#), [143](#)
- [9] C.N.R Rao, F.L Deepak, G. Gundiah and A. Govindaraj. Inorganic nanowires. Progress in Solid State Chemistry, 31(1-2) (2003) 5-147. [3](#), [10](#)
- [10] A. Benyoussef et N. Boccara. Phase diagrams of random Ising models : simple and systematic successive approximations. J. Appl. Phys, 44(10) (1983) 1143-1147. [3](#)

Bibliographie

- [11] A. Benyoussef et N. Boccara. Lower critical dimensionality of the spinâglass phase transition. *J. Appl. Phys*, 55(6) (1984) 1667-1668. [3](#)
- [12] H. Hanmura et T. Kaneyoshi. Comment on Girvin's method for the Ising model. *J. Phys. C*, 11 (1978) 973. [3](#)
- [13] T. Kaneyoshi, I. P. Fittipaldi, R. Honmura and T. Manabe. New correlated-effective-field theory in the Ising model. *Physical Review B*, 24(1) (1981) 481. [3](#)
- [14] J. W. Tucker, M. Saber and L. Peliti. A new technique in the effective field theory of general spin S dilute Ising models. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 206(3-4) (1994) 497-507. [3](#)
- [15] K. Htoutou, Y. Benhouria, A. Oubelkacem et L. B. Drissi. Random crystal field effect on hysteresis loops and compensation behavior of mixed spin-(1, 3/2) Ising system. *Chinese Physics B*, 26(12) (2017) 127501. [3](#)
- [16] T. Kaneyoshi. Phase diagrams of a transverse Ising nanowire. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 322(20) (2010) 3014-3018. [3](#)
- [17] K. Htouiou, Etude des Propriétés Magnétiques dans les Super-Réseaux et les Systèmes désordonnés. Thèse de doctorat. 2004. [4](#), [99](#)
- [18] S. K. Mitro, K. M. Hossain, R. Majumder et M. Z. Hasan. Effect of the negative chemical pressure on physical properties of doped perovskite molybdates in the framework of DFT method. *Journal of Alloys and Compounds*, 854 (2021) 157088. [4](#)
- [19] S. Y. Müller, V. Koerting, D. Schuricht et S. Andergassen. Spin and orbital fluctuations in non-equilibrium transport through quantum dots: A renormalisation-group analysis. *EPL (Europhysics Letters)*, 92(1) (2010) 10002. [4](#)
- [20] N. Metropolis, S. Ulam, The monte carlo method. *Journal of the American statistical association*, 44(247) (1949) 335-341. [4](#), [75](#), [103](#), [109](#), [143](#)
- [21] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller et E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, 21(6) (1953) 1087-1092. [4](#), [75](#), [81](#), [103](#), [109](#), [143](#)
- [22] W. Jiang, X. X. Li, L. M. Liu, J. N. Chen et F. F. Zhang. Hysteresis loop of a cubic nanowire in the presence of the crystal field and the transverse field. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 353 (2014) 90-98. [5](#)

-
- [23] H. Bouda, T. Bahlagui, L. Bahmad, R. Masrour, A. El Kenz et A. Benyoussef. Hysteresis Cycle and Magnetization Behaviors of a Mixed-Spin ($7/2$, $3/2$) Ferrimagnetic Ising Model: Monte Carlo Investigation. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 32(8) (2019) 2539-2550. [5](#)
- [24] R. G. B. Mendes, F. S. Barreto et J. P. Santos. Magnetic properties of the mixed spin $1/2$ and spin 1 hexagonal nanotube system: Monte Carlo simulation study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 471 (2019) 365-369. .
- [25] T. Sahdane, R. Masrour et A. Jabar. Dielectric properties of the mixed spins ($S = 5/2$, $\sigma = 3/2$) and ($\sigma = 5/2$, $S = 3/2$) in nanotube system: A Monte Carlo study. *Solid State Communications*, 310 (2020) 113851. [5](#)
- [26] D. Lv, F. Wang, R. J. Liu, Q. Xue et S. X. Li. Monte Carlo study of magnetic and thermodynamic properties of a ferrimagnetic mixed-spin (1 , $3/2$) Ising nanowire with hexagonal core-shell structure. *Journal of Alloys and Compounds*, 701 (2017) 935-949. [5](#)
- [27] R. Masrour, A. Jabar, A. Benyoussef, M. Hamedoun et L. Bahmad. Hysteresis and compensation behaviors of mixed spin-2 and spin-1 hexagonal Ising nanowire core-shell structure. *Physica B: Condensed Matter*, 472 (2015) 19-24. [5](#)
- [28] R. G. B. Mendes, F. S. Barreto et J. P. Santos. Magnetic properties of the mixed hexagonal nanowire system with half and integer spins: Monte Carlo simulation and mean field approximation study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 513 (2020) 167150. [5](#)
- [29] M. Gharaibeh, S. Alqaiem, A. Obeidat, A. Al-Qawasmeh, S. Abedrabbo et M. H. Badarneh. Magnetic properties of the ferrimagnetic triangular nanotube with core-shell structure: A Monte Carlo study. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 584 (2021) 126394. [5](#)
- [30] J. Y. Liang, C. L. Zou, W. Jiang et X. X. Li. Ferrimagnetic behaviors in a double-wall cubic metal nanotube. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 69 (2015) 81-88. [5](#)
- [31] A. Jabar, R. Masrour, A. Benyoussef et M. Hamedoun. Ferrimagnetic behaviors in a double-wall cubic metal nanotube: a Monte Carlo Study. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 29(7) (2016) 1953-1959. [5](#)

Bibliographie

- [32] H. Heitmann, J. P. Krumme et K. Witter. Magneto-optic memory materials. *Optica Acta: International Journal of Optics*, 24(4) (1977) 483-494. [5](#)
- [33] H. Zhu, S. J. Pookpanratana et J. E. Bonevich, S. N. Natoli, C. A. Hacker, T. Ren et Q. Li. Redox-active molecular nanowire flash memory for high-endurance and high-density nonvolatile memory applications. *ACS Applied Materials Interfaces*, 7(49) (2015) 27306-27313. [5](#)
- [34] H. C. Oersted. Expériences sur l'effet du conflit électrique sur l'aiguille aimantée. *Annales de chimie et de physique*, 14 (1820) 417-425. [5](#)
- [35] J. Sinnott. Etude théorique et pratique de l'état solide. Paris : Eyrolleands, (1961) 440-481. [9](#)
- [36] D. Jiles. Iowa State University. Ames. Iowa. USA. 1991. [11](#), [22](#)
- [37] W. Nolting et A. Ramakanth. Quantum Theory of Magnetism. Springer, (2009). [12](#), [14](#), [21](#), [22](#)
- [38] R. Thompson. Environmental magnetism. Springer, (2012). [14](#), [18](#), [23](#)
- [39] X. Chen et A. Selloni. Introduction: Titanium Dioxide (TiO_3) Nanomaterials. *Chem. Rev.* 114 (2014) 9281-9282. [14](#), [18](#)
- [40] H. Laville, J. M. riedt, J. C. Bernier et N. Hassanian. Propriétés magnétiques d'un oxyde amorphe riche en fer: $Fe_2 O_3$ (30) BaO (45) $B_2 O_3$ (25). *Revue de Physique Appliquée*, 15(6) (1980) 1133-1137. [23](#), [25](#)
- [41] G. Ferey. Cinquième partie-Propriétés magnétiques des amorphes ioniques. *Revue de Physique Appliquée*, 15(6) (1980) 1043-1048. [23](#)
- [42] R. Hussain, B. Brahma, R. K. Basumatar, R. Brahma, S. Ravi et S. K. Srivastava. Sperrimagnetism in Perpendicularly Magnetized Co-Tb Alloy-Based Thin Films. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 32(12) (2019) 4027-4031. [23](#)
- [43] J. Becquerel et J. Van Den Handel. Le métamagnétisme. *Journal de Physique et le Radium*, 10(1) (1939) 10-13. [23](#)
- [44] T. A. Saleh et V. K. Gupta. Nanomaterial and Polymer Membranes-1st Edition. Elsevier, (2016) 83-133. [24](#)

- [45] S. Gong et W. Cheng. One-dimensional nanomaterials for soft electronics. *Adv. Electron. Mater.*, 3 (2017). [25](#)
- [46] F. Hadeef, An introduction to nanomaterials-CAB Direct. Springer, (2018) 1-58. [25](#)
- [47] B. D. Malhotra et M. A. Ali. Nanomaterials in biosensors: Fundamentals and applications, (2017) 1-74. [25](#)
- [48] E. Roduner. Size matters: why nanomaterials are different. *Chem. Soc. Rev.*, 35 (2006) 583-592. [26](#)
- [49] W. E. Teo et S. Ramakrishna, A review on electrospinning design and nanofibre assemblies, *Nanotechnology*, 17 (2006) R89-R106. [26](#)
- [50] Q. Wei, F. Xiong, S. Tan, L. Huang, E. H. Lan, B. Dunn et L. Mai. Porous one-dimensional nanomaterials: design, fabrication and applications in electrochemical energy storage. *Adv. Mater.*, 29 (2017). [27](#)
- [51] Y. Cui, Z. Zhong, D. Wang, W. U. Wang et C. M. Lieber. High performance silicon nanowire field effect transistors. *Nano Lett.*, 3 (2003) 149-152. [27](#)
- [52] R. S. Wagner et W. C. Ellis, Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth, *Appl. Phys. Lett.*, 4 (1964) 89-90. [27](#)
- [53] M. Kaur, K. P. Muthe, S. K. Deshpande, S. Choudhury, J. B. Singh, N. Verma, S. K. Gupta et J. V. Yakhmi. J. Cryst. Growth and branching of CuO nanowires by thermal oxidation of copper. *Growth*, 289 (2006) 670-675. [27](#)
- [54] Y. Song, R. M. Garcia, R. M. Dorin, H. Wang, Y. Qiu, E. N. Coker, W. A. Steen, J. E. Miller et J. A. Shelnutt. Synthesis of platinum nanowire networks using a soft template. *Nano Lett.*, 7 (2007) 3650-3655. [27](#)
- [55] W. Lee et S. J. Park. Porous anodic aluminum oxide: anodization and templated synthesis of functional nanostructures. *Chem. Rev.*, 114 (2014) 7487-7556. [27](#)
- [56] T. A. Crowley, K. J. Ziegler, D. M. Lyons, D. Erts, H. Olin, M. A. Morris et J. D. Holmes. Synthesis of metal and metal oxide nanowire and nanotube arrays within a mesoporous silica template. *Chem. Mater.*, 15 (2003) 3518-3522. [27](#)

Bibliographie

- [57] C. Schonenberger, B. M. I. van der Zande, L. G. J. Fokkink, M. Henny, C. Schmid, M. Kruger, A. Bachtold, R. Huber, H. Birk et U. Staufer. Template synthesis of nanowires in porous polycarbonate membranes: electrochemistry and morphology. *J. Phys. Chem. B*, 101 (1997) 5497-5505. [27](#)
- [58] W. Han, P. Redlich, F. Ernst et M. Ruhle. Synthesizing boron nitride nanotubes filled with SiC nanowires by using carbon nanotubes as templates. *Appl. Phys. Lett*, 75 (1999), 1875-1877. [27](#)
- [59] X. Wang et Y. Li. Selected-Control Hydrothermal Synthesis of α - and β - MnO_2 Single Crystal Nanowires. *J. Am. Chem. Soc*, 124 (2002) 2880-2881. [27](#)
- [60] S. Y. Min, T. S. Kim, B. J. Kim, H. Cho, Y. Y. Noh, H. Yang, J. H. Cho et T. W. Lee. Large-scale organic nanowire lithography and electronics. *Nat. Commun*, 4 (2013) 1773. [28](#)
- [61] A. W. Zhao, G. W. Meng, L. D. Zhang, T. Gao, S. H. Sun et Y. T. Pang. Electrochemical synthesis of ordered *CdTe* nanowire arrays. *Appl. Phys. A Mater. Sci. Process*, 76 (2003) 537-539. [28](#)
- [62] X. Li, Z. Gu, J. Cho, H. Sun et P. Kurup. Sens. Tinâcopper mixed metal oxide nanowires: synthesis and sensor response to chemical vapors. *Actuators B*, 158 (2011) 199-207. [28](#)
- [63] G. Kawamura, H. Muto et A. Matsuda, Hard template synthesis of metal nanowires, *Front Chem*, 2 (2014) 104. [28](#)
- [64] J. B. Baxter et E. S. Aydil. Nanowire-based dye-sensitized solar cells. *Appl. Phys. Lett*, 86 (2005) 053114. [28](#)
- [65] J. Wang, Z. Li et Z. Gu. A comprehensive review of template-synthesized multi-component nanowires: From interfacial design to sensing and actuation applications. *Sensors and Actuators Reports*, (2021) 100029. [29](#)
- [66] H. Dai, Carbon nanotubes: opportunities and challenges, *Surf. Sci*, 500 (2002) 218-241. [29](#)
- [67] V. Popov, Carbon nanotubes: properties and application, *Mater. Sci. Eng*, 43 (2004) 61-102. [31](#)
- [68] S. K. Karna, Properties and applications of carbon nanotubes, Physics Department, NTNU, (2007). [31](#)

-
- [69] S. M. Bhagyaraj et O. S. Oluwafemi. Synthesis of Inorganic Nanomaterials, (2018) 1-18. [31](#), [32](#), [33](#)
- [70] A. Akbarzadeh, M. Samiei et S. Davaran. Magnetic nanoparticles: preparation, physical properties, and applications in biomedicine. *Nanoscale Res. Lett*, 7 (2012) 144. [33](#)
- [71] N. Karak. Fundamentals of nanomaterials and polymer nanocomposites. *Nanocomposites*, (2019) 1-45. [33](#)
- [72] J. K. Xu, F. F. Zhang, J. J. Sun, J. Sheng, F. Wang et M. Sun. Bio and Nanomaterials Based on Fe_3O_4 . *Molecules*, 19 (2014) 21506-21528. [34](#)
- [73] C. Kittel. Physical Theory of Ferromagnetic Domains. *Reviews of modern Physics*, 21.4 (1949) 541. [34](#)
- [74] W. F. Brown. The fundamental theorem of the theory of fine ferromagnetic particles. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 147(12) (1969) 463-488. [34](#)
- [75] E. M. Brunzman, J. H. Scott, S. A. Majetich, M. E. McHenry et M. Q. Huang. Magnetic properties of monodomain $NdFeB$ nanoparticles. *Journal of applied physics*, 79(8) (1996) 5293-5295.. [35](#)
- [76] S. P. Gubin, *Magnetic nanoparticles*. John Wiley & Sons, (2009). [35](#)
- [77] O. Popov et M. Mikhov. Temperature and magnetic field dependence of the critical single domain size. *physica status solidi (a)*, 118(1) (1990) 289-294. [36](#)
- [78] I. Dzyaloshinsky. A thermodynamic theory of weak ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 4(4) (1958) 241-255. [1](#), [36](#)
- [79] J. M. D. Coey J M D, *Rare-earth Iron Permanent Magnets*. Clarendon Press, Oxford. (ed.) (1996). [41](#)
- [80] S. Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*. Clarendon Press, Oxford. (1997). [47](#)
- [81] H. R. Kirchmayr. In: Long G J, Grandjean F (eds.) *Supermagnets, Hard Magnetic Materials*. Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, (1991) 449-60. [47](#)
- [82] H. R. Kirchmayr. Permanent magnets and hard magnetic materials. *J. Phys. D: Appl. Phys*, 29(11) (1996) 2763-78. [48](#)

Bibliographie

- [83] H. R. Kirchmayr et E. Burzo. Physical properties of $R_2Fe_{14}B$ -based alloys. Handbook on the physics and chemistry of rare earths, 12 (1989) 71-132. [48](#)
- [84] T. Mizoguchi, G. S. Cargill. Magnetic anisotropy from dipolar interactions in amorphous ferrimagnetic alloys. Journal of Applied Physics, 50(5) (1979) 3570-3582. [48](#)
- [85] W. Wang, D. Lv, F. Zhang, J. L. Bi et J. N. Chen. Monte Carlo simulation of magnetic properties of a mixed spin-2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system in a longitudinal magnetic field. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 385 (2015) 16-26. [48](#)
- [86] J. Osborn. Demagnetizing factors of the general ellipsoid. Physical review, 67(11-12) (1945) 351. [48](#)
- [87] G. Bayreuther. Magnetic surfaces. Hyperfine Interact. 47 (1989) 237-49. [49](#)
- [88] P. Papon, J. Leblond et P. H. E. Meijer. Physique des transitions de phases. (1999). [50](#)
- [89] P. Sciau, G. Calvarin et J. Ravez. Structures des phases paraélectrique et ferroélectrique de $Pb_2KNb_5O_{15}$. Acta Crystallographica Section B: Structural Science, 55(4) (1999) 459-466. [50](#)
- [90] R. S. Askhadullin, V. V. Dmitriev, D. A. Krasnikhin, P. N. Martynov, A. A. Osipov, A. A. Senin et A. N. Yudin. Phase diagram of superfluid 3He in nematically ordered aerogel. JETP letters, 95(6) (2012) 326-331. [52](#)
- [91] A. Sokol et D. Pines. Toward a unified magnetic phase diagram of the cuprate superconductors. Physical review letters, 71(17) (1993) 2813. [52](#)
- [92] O. Antonevych, F. Forstmann et E. Diaz-Herrera. Phase diagram of symmetric binary fluid mixtures: First-order or second-order demixing. Physical Review E, 65(6) (2002) 061504. [52](#)
- [93] K. Oki, M. Hasaka et T. Eguchi. Process of order-disorder transformation in iron-aluminum alloys. Japanese Journal of Applied Physics, 12(10) (1973) 1522. [52](#)
- [94] J. S. Lintuvuori et M. R. Wilson. A new anisotropic soft-core model for the simulation of liquid crystal mesophases. The Journal of chemical physics, 128(4) (2008) 044906. [52](#)
- [95] F. P. Bundy. Pressure-temperature phase diagram of elemental carbon. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 156(1) (1989) 169-178. [52](#)

-
- [96] Z. Honda, H. Asakawa et K. Katsumata. Magnetic Field versus Temperature Phase Diagram of a Quasi-One-Dimensional $S = 1$ Heisenberg Antiferromagnet. *Physical review letters*, 81(12) (1998) 2566. [2](#), [52](#), [65](#)
- [97] R. J. Birgeneau, G. Shirane, M. Blume et W. C. Koehler. Tricritical-Point Phase Diagram in $FeCl_2$. *Physical Review Letters*, 33(18) (1974) 1098. [53](#)
- [98] G. Jaeger. The Ehrenfest classification of phase transitions: introduction and evolution. *Archive for history of exact sciences*, 53(1) (1998) 51-81. [54](#)
- [99] I. Herbut. A modern approach to critical phenomena, Simon Fraser University Cambridge University Press. (2007). [55](#)
- [100] T. Guénault, *Statistical Physics*, Springer, (2007). [56](#)
- [101] V. L. Ginzburg et L. D. Landau. On the theory of superconductivity. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 20 (1950) 1064. [57](#)
- [102] K. Fabian, V. P. Shcherbakov et S. A. McEnroe, Measuring the Curie temperature, *Geochem. Geophys. Geosyst*, 14 (2013) 947-961. [57](#)
- [103] J. Ade-Hall, R. Wilson et P. Smith. The petrology, Curie points and natural magnetizations of basic lavas. *Geophys. J*, 9 (1965) 323-336. [59](#)
- [104] A. Arrott. Criterion for ferromagnetism from observations of magnetic isotherms. *Phys. Rev*, 108 (1957) 1394-1396. [59](#)
- [105] N. Petersen et U. Bleil, Curie temperature, in *Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology* edited by G. Angenheister, Springer Materials: The Landolt-Börnstein database. (1982). [59](#)
- [106] J. Villain et J. M. Loveluck. Néel temperature of a low-dimensional antiferromagnet in a magnetic field. *Journal de Physique Lettres*, 38(2) (1977) 77-80. [59](#), [73](#)
- [107] X. G. Zheng, C. N. Xu, K. Nishikubo, K. Nishiyama, W. Higemoto, W. J. Moon, E. Tanaka et E. S. Otake. Finite-size effect on Néel temperature in antiferromagnetic nanoparticles. *Physical Review B*, 72(1) (2005) 014464. [60](#)
- [108] Pati, S. Prakash, M. Al-Mahdawi, S. Ye, Y. Shiokawa, T. Nozaki et M. Sahashi. Finite-size scaling effect on Néel temperature of antiferromagnetic Cr_2O_3 (0001) films in exchange-coupled heterostructures. *Physical Review B*, 94(22) (2016) 224417. [60](#)

Bibliographie

- [109] B. Nmaila, K. Htoutou, L. B. Drissi et R. A. Laamara. The magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-(3/2, 2) hexagonal Ising nanowire system with alternate layers. *Solid State Communications*, (336) (2021) 114418. [60](#)
- [110] N. F. Zounmenou, S. I. V. Hontinfinde, J. Kple, M. Karimou et F. Hontinfinde. Magnetic properties of a spin-7/2 and spin-5/2 core/shell nanowire: a Monte Carlo study. *Applied Physics A*, 126(9) (2020) 1-13. [4](#), [5](#), [61](#), [99](#), [118](#), [119](#), [120](#), [122](#), [123](#), [124](#)
- [111] H. Bouda, L. Bahmad, R. Masrour et A. Benyoussef. Compensation behavior in a ferrimagnetic mixed spin-7/2 and spin-3: Monte Carlo simulation. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 32(6) (2019) 1837-1845. [61](#)
- [112] B. Deviren, M. Keskin et O. Cankö. Magnetic properties of an anti-ferromagnetic and ferrimagnetic mixed spin-1/2 and spin-5/2 Ising model in the longitudinal magnetic field within the effective-field approximation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 388(9) (2009) 1835-1848. [61](#)
- [113] E. Kantar et M. Keskin. Thermal and magnetic properties of ternary mixed Ising nanoparticles with core-shell structure: Effective-field theory approach. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 349 (2014) 165-172. [61](#)
- [114] M. Keskin et M. Ertaş. Mixed-spin Ising model in an oscillating magnetic field and compensation temperature. *Journal of Statistical Physics*, 139(2) (2010) 333-344. [61](#), [99](#)
- [115] Y. F. Zhang et S. L. Yan. The phase diagrams and compensation behaviors of mixed spin Blume-Capel model in a trimodal magnetic field. *Physics Letters A*, 372(15) (2008) 2696-2700. [61](#)
- [116] J. Strečka. Exact results of a mixed spin-1/2 and spin-S Ising model on a bathroom tile (4×8) lattice: Effect of uniaxial single-ion anisotropy. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 360(2) (2006) 379-390. [61](#)
- [117] J. S. Smart. The Néel theory of ferrimagnetism. *American Journal of Physics*, 23(6) (1955) 356-370. [2](#), [62](#), [100](#), [111](#), [118](#), [140](#), [142](#)
- [118] P. Robert, *Traité d'électricité: Matériaux de l'électrotechnique*. Lausanne : Presses polytechniques et universitaires Romandes, 2 (1989). [62](#), [100](#)
- [119] P. Brissonneau. *Génie électrique*, 2(D2090) (1990) 2090-1. [63](#)

- [120] B. A. Tuan. Caractérisation et modélisation du comportement des matériaux magnétiques doux sous contrainte thermique. These de doctorat, (2006). [63](#)
- [121] I. A. Hadjiagapiou, A. Malakis et S. Martinos. Monte Carlo analysis of critical properties of the two-dimensional randomly site-diluted Ising model via Wang-Landau algorithm. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 387(10) (2008) 2256-2266. [64](#), [65](#), [66](#)
- [122] W. Heisenberg. Zur theorie des ferromagnetismus. Springer, (1985) 580-597. [67](#)
- [123] H. E. Stanley. Phase transitions and critical phenomena. Clarendon Press, Oxford, 7 (1971). [67](#), [68](#)
- [124] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. Zeitschrift für Physik, 31(1) (1925) 253-258. [68](#), [70](#), [72](#), [75](#)
- [125] L. Wilhelm, Physikalische Zeitschrift, 21 (1920) 613-615. [68](#), [70](#)
- [126] M. Blume. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 . Physical Review, 141(2) (1966) 517. [68](#), [70](#), [71](#), [72](#), [74](#)
- [127] F. Y. Wu. The potts model. Reviews of modern physics, 54(1) (1982) 235. [68](#)
- [128] R. B. Potts. Some generalized order-disorder transformations. Proc. Camb. Phil. 48(1) (1952) 106-109. [68](#), [70](#)
- [129] N. S. Branco. Blume-Emery-Griffiths model in a random crystal field. Physical Review B, 60(2) (1999) 1033. [68](#), [70](#), [71](#), [72](#), [73](#)
- [130] S. Capponi, S. S. Jahromi, F. Alet et K. P. Schmidt. Baxter-Wu model in a transverse magnetic field. Physical Review E, 89(6) (2014) 062136. [68](#)
- [131] R. J. Baxter. Exactly solved models in statistical mechanics. Elsevier, (2016). [68](#)
- [132] A. Knapp. Chinese supercomputer is now the world fastest-by a lot, (2013). [68](#), [70](#)
- [133] J. M. Kosterlitz. The critical properties of the two-dimensional xy model. Journal of Physics C: Solid State Physics, 7(6) (1974) 1046. [68](#), [69](#)
- [134] L. Onsager. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. Physical Review, 65(3-4) (1944) 117. [70](#), [72](#), [73](#), [74](#)

Bibliographie

- [135] Y. Velenik. Le modèle d'ising. (2009). [71](#)
- [136] J. Ashkin et E. Teller. Statistics of Two-Dimensional Lattices with Four Components. *Physical Review*, 64(5-6) (1943) 178. [71](#)
- [137] T. Kihara, Y. Midzuno et J. Shizume. Statistics of two-dimensional lattices with many components. *J. Phys. Soc. Jpn.* 9 (1954) 681. [71](#)
- [138] F. Graner et J. A. Glazier. Simulation of biological cell sorting using a two-dimensional extended Potts model. *Physical review letters*, 69(13) (1992) 2013. [71](#)
- [139] J. B. Kogut. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Reviews of Modern Physics*, 51(4) (1979) 659. [72](#)
- [140] K. A. Kramers et G. H. Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I. *Physical Review*, 60(3) (1941) 252. [72](#)
- [141] R. K. P. Zia et D. J. Wallace. Critical behaviour of the continuous n-component Potts model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 8(9) (1975) 1495. [73](#)
- [142] D. D. Betts. The exact solution of some lattice statistics models with four states per site. *Canadian Journal of Physics*, 42(8) (1964) 1564-1572. [73](#)
- [143] F. C. Marius et P. W. Kasteleyn. On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models. *Physica*, 57(4) (1972) 536-564. [74](#)
- [144] M. Blume, V. J. Emery et R. B. Griffiths. Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in He^3 - He^4 Mixtures. *Phys. Rev. A*, 4 (1971) 1071-1077. [74](#)
- [145] E. Barouch, B. M. McCoy et M. Dresden, Statistical mechanics of the XY model. I. *Physical Review A*, 2(3) (1970) 1075. [74](#)
- [146] A. W. Sandvik. *Physical review letters*, 80(23) (1998) 5196. [74](#)
- [147] B. Alder et T. Wainwright, Statistical mechanical theory of transport properties, *Proceedings of the international union of pure and applied physics*, Brussels, (1956). [75](#)
- [148] L. M. Sobol, *A Primer for the Monte Carlo Method*, CRC Press, (1994). [75](#)
- [149] G. S. Fishman, *Monte Carlo Concepts, Algorithms, and Applications*, Springer, (2013). [76](#), [80](#)

-
- [150] A. P. J. Jansen, An introduction to kinetic Monte Carlo simulations of surface reactions, Springer, (2012). [77](#)
- [151] U. Burghaus, A Practical Guide to Kinetic Monte Carlo Simulations and Classical Molecular Dynamics Simulations, Nova Science Publishers, (2006). [77](#)
- [152] W. Krauth, Statistical Mechanics Algorithms and Computations, Oxford University Press, (2006). [77](#)
- [153] C. Gaetan et X. Guyon, Modélisation et statistique spatiales, Springer, (2011). [77](#), [80](#)
- [154] W. S. Kendall, F. Liang et J. S. Wang, Markov Chain Monte Carlo Innovations and Applications, World Scientific Publishing, (2005). [77](#)
- [155] F. James, Reports on progress in Physics, 43(9) (1980) 1145. [77](#), [79](#)
- [156] M. E. J. Newman et G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Oxford University press, (2002). [79](#)
- [157] M. P. Allen et D. J. Tildesley, Computer simulation of liquids. Oxford University Press, Oxford New York, (1987). [2](#), [3](#), [80](#), [82](#), [83](#), [84](#), [90](#)
- [158] M. Arejda, Theoretical study of the magnetic properties and the magnetocaloric effect of materials: Spintronics materials (dendrimer models) and magnetic refrigeration materials (mnas/mnbi), (2017) 36. [82](#)
- [159] C. H. Lee, S. Y. Yun et Y. Yi. From Glauber dynamics to Metropolis algorithm: Smaller delay in optimal CSMA. IEEE International Symposium on Information Theory Proceedings, (2012) 2681-2685. [2](#), [85](#)
- [160] U. Wolff. Collective Monte Carlo updating for spin systems. Phys. Rev. Lett, 62 (1989) 361. [87](#)
- [161] R. H. Swendsen et J. S. Wang. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. Phys. Rev. Lett, 58 (1987) 86. [89](#), [92](#), [94](#)
- [162] C. M. Fortuin et P. W. Kasteleyn. On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models. Physica, 57 (1972) 536. [89](#), [92](#), [94](#)
- [163] A. Coniglio et W. Klein. Clusters and Ising critical droplets: a renormalisation group approach. J. Phys. A, 13 (1980) 2775. [92](#)

Bibliographie

- [164] F. Niedermayer. General cluster updating method for Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. Lett*, 61 (1988) 2026. [92](#)
- [165] A. Feraoun, A. Zaim et M. Kerouad. Monte Carlo study of the phase diagrams of a ferrimagnetic nanowire with alternate layers. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 29(4) (2016) 971-980. [94](#)
- [166] K. Htoutou, A. Ainane et M. Saber. The transverse crystal-field effects of the mixed spin Ising bilayer system. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 269(2) (2004) 245-258. [99](#)
- [167] E. Kantar et Y. Kocakaplan. Hexagonal type Ising nanowire with core/shell structure: The phase diagrams and compensation behaviors. *Solid State Commun*, 177 (2014) 1. [99](#)
- [168] Y. Kocakaplan et E. Kantar. Thermodynamic and magnetic properties of the hexagonal type Ising nanowire. *Eur. Phys. J. B*, 87 (2014) 135. [99](#)
- [169] T. Kaneyoshi. Mean-field analysis of a ferrimagnetic mixed spin system. *J. C. Chen, J. Magn. Magn. Mater*, 98 (1991) 201. [99](#)
- [170] J. A. Plascak. Multicritical points in the ferromagnetic binary Ising model. *Physica A*, 198 (1993) 665. [99](#)
- [171] Y. Yüksel, E. Aydın et H. Polat. Thermal and magnetic properties of a ferrimagnetic nanoparticle with spin-3/2 core and spin-1 shell structure. *J. Magn. Magn. Mater*, 323 (2011) 3168. [99](#)
- [172] N. De La Espriella, C. A. Mercadob et G. M. Buendia. Critical and compensation points of a mixed spin-2-spin-5/2 Ising ferrimagnetic system with crystal field and nearest and next-nearest neighbors interactions. *J. Magn. Magn. Mater*, 417 (2016) 30. [99](#)
- [173] L. Ertl, G. Endl et H. Hoffmann. Structure and magnetic properties of sputtered Tb/Co multilayers. *J. Magn. Magn. Mater*, 113 (1992) 227. [99](#)
- [174] M. Gharaibeh, M. H. Badarneh, S. Alqaiem, A. Obeidat et M. K. Qaseer. Magnetic properties and phase diagrams of mixed spin-1 and spin-1/2 Ising model on a checkerboard square structure: A Monte Carlo study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 540 (2021) 168458. [100](#)

- [175] A. Bobak, O.F. Abubrig et D. Horvath. An effective-field study of the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising ferrimagnetic system. *J. Magn. Magn. Mater*, 246 (2002) 177. [100](#)
- [176] L. B. Drissi et S. Zriouel. Graphyne core/shell nanoparticles: Monte Carlo study of thermal and magnetic properties. *Stat. Mech.* (2016) 053206. [100](#)
- [177] M. Keskin et M. Ertas. Dynamic magnetic properties of a hexagonal Ising nanowire system with higher-spin. *Phase Transitions*, 93(4) (2020) 361-375. [100](#), [144](#)
- [178] W. Wang, W. Jiang et D. Lv. Monte Carlo simulation of step effect on molecular-based magnets. *Phys. Stat. Soli. (b)*, 249 (2012) 190. [100](#)
- [179] M. Keskin, N. Sarli et B. Deviren. Hysteresis behaviors in a cylindrical Ising nanowire. *Solid State Commun*, 151 (2011) 1025. [100](#)
- [180] K. Htoutou, Y. Benhouria, A. Oubelkacem, R. Ahl laamara et L. B. Drissi. Random crystal field effect on hysteresis loops and compensation behavior of mixed spin-(1, 3/2) Ising system. *Chin Phys B*, 26(12) (2017) 127501. [3](#), [100](#), [102](#)
- [181] Y. Benhouria, I.Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja et F. Dujardin. The dielectric properties and the hysteresis loops of the spin-1 Ising nanowire system with the effect of a negative core/shell coupling: A Monte Carlo study. *Superlattices and Microstructures*, 73 (2014) 121-135. [100](#)
- [182] K. Htoutou et A. Arbaoui. Effective-field theory with the probability distribution technique for a spin-3/2 core and spin-2 shell Ising nanowire: Thermodynamic properties and hysteresis behaviors. *Physica B: Condensed Matter*, (2022) 414095. [100](#)
- [183] Y. Kocakaplan et M. Keskin. Hysteresis loops and compensation behavior of cylindrical transverse spin-1 Ising nanowire with the crystal field within effective-field theory based on a probability distribution technique. *The European Physical Journal B*, 86(10) (2013) 1-9. [100](#), [128](#)
- [184] W. Jiang, V. Cheong Lo, B. D. Bai et J. Yang. Magnetic hysteresis loops in molecular-based magnetic materials $AFe^{II}Fe^{III}(C_2O_4)_3$. *Physica A*, 389 (2010) 2227. [100](#), [128](#)
- [185] M. Ertas et Y. Kocakaplan. Dynamic behaviors of the hexagonal Ising nanowire. *Phys. Lett. A*, 378 (2014) 845. [100](#)

Bibliographie

- [186] G. M. Buendia et E. Machado. Kinetics of a mixed Ising ferrimagnetic system. *Phys. Rev. E.* 58 (1998) 1260. [100](#)
- [187] B. C. Park, et Y. K. Kim. Synthesis, microstructure, and physical properties of metallic barcode nanowires. *Met. Mater. Int.*, 23 (2017) 413. [100](#)
- [188] E. M. Palmero, C. Bran, R. P. del Real et M. Vazquez. Synthesis and magnetism of modulated FeCo-based nanowires. *J. Phys. Conf. Series*, 755 (2016) 012001. [101](#)
- [189] H. L. Su, S. L. Tang, R. L. Wang, Y. Q. Chen, C. Jia et Y. W. Du. $Fe_{48}Co_{52}$ Alloy Nanowire Arrays: Effects of Magnetic Field Annealing. *Chin. J. Chem. Phys.*, 22 (2009) 82. [101](#)
- [190] K.V. Shanavas, M. A. McGuire et D. S. Parker. Electronic and magnetic properties of Si substituted Fe_3Ge . *J. Appl. Phys.*, 118 (2015) 123902. [101](#)
- [191] M. Nath, A. Choudhury, A. Kundu et C. N. R. Rao. Synthesis and characterization of magnetic iron sulfide nanowires. *Adv. Mater.*, 15 (2003) 2098. [101](#)
- [192] X. Lin, G. Ji, T. Gao, X. Chang, Y. Liu, H. Zhang et Y. Du. Ultrafine $Fe-Co$ nanowires: Fabrication and heat treatment influence on the structure and magnetic properties. *Solid State Commun.*, 151 (2011) 1708. [101](#)
- [193] K. Htoutou, B. Nmaila, M. Madani, L. B. Drissi et R. A. Laamara. Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1, 1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers. *Materials Research Express*, 4(11) (2017) 116108. [101](#), [114](#)
- [194] B. Nmaila, K. Htoutou, R. A. Laamara et L. B. Drissi. Thermodynamic and magnetic properties of a mixed spins (3/2, 5/2) Ising nanowire with hexagonal structure: Monte Carlo simulation. *Indian Journal of Physics*, (2022) 1-10. [3](#), [101](#), [104](#), [106](#), [107](#), [108](#), [114](#)
- [195] L. A. Reyes, N. De La Espriella et G. M. Buendia. Effects of an external magnetic field on a mixed-spin and Ising ferrimagnet: A Monte Carlo study. *physica status solidi (b)*, 252(10) (2015) 2268-2274. [3](#), [4](#), [101](#), [108](#), [110](#), [111](#), [112](#), [113](#), [114](#), [115](#), [116](#)
- [196] N. De La Espriella et G. M. Buendia. Magnetic behavior of a mixed Ising 3/2 and 5/2 spin model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23(17) (2011) 176003. [101](#), [110](#), [111](#), [112](#), [117](#)

-
- [197] B. Deviren et M. Keskin. Dynamic phase transitions and compensation temperatures in a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising system. *Journal of Statistical Physics*, 140(5) (2010) 934-947. [110](#), [111](#), [112](#), [117](#)
- [198] L. Sun, W. Wang, D. Lv, Z. Y. Gao, Q. Li et B. C. Li. Magnetic and thermodynamic behaviors of the graphene-like quantum dots: A Monte Carlo study. *J. Magn. Magn. Mater*, 528 (2021) 167820. [111](#), [116](#), [117](#)
- [199] H. Zhou, Y. Yiu, M. C. Aronson et S. S. Wong. Ambient template synthesis of multiferroic $MnWO_4$ nanowires and nanowire arrays. *J Solid State Chem*, 181(7) (2008) 1539-1545. [113](#), [116](#), [117](#)
- [200] H. W. Wu and C. J. L. Tsai. Nanotechnology enabled microfluidics/Raman spectroscopy systems for bio applications. *J Chen Appl Phys Lett*, 90(4) (2007) 043121. [113](#), [117](#)
- [201] Q. Li, R. D. Li, W. Wang, R. Z. Geng, H. Huang et S. J. Zheng. Magnetic and thermodynamic characteristics of a rectangle Ising nanoribbon. *Physica A*, 555 (2020) 124741. [117](#)
- [202] M. Tarnaoui, A. Zaim et M. Kerouad. The effect of a random transverse field on the critical and compensation behaviors of a nanowire. *Physica B: Condensed Matter*, 571 (2019) 50-56.. [119](#), [120](#), [121](#), [125](#)
- [203] N. Zaim, A. Zaim et M. Kerouad. Monte Carlo study of the random magnetic field effect on the phase diagrams of a spin-1 cylindrical nanowire. *J. Alloys Compd*, 663 (2016) 516-523. [120](#), [121](#)
- [204] D. Lv, W. Jiang, Y. Ma, Z. Gao et F. Wang. Magnetic and thermodynamic properties of a cylindrical ferrimagnetic Ising nanowire with core/shell structure. *Physica E*, 106 (2019) 101-113. [120](#), [121](#)
- [205] H. Magoussi, A. Zaim et M. Kerouad. Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume-Capel nanowire. *Solid State Commun*, 200 (2014) 32-41. [121](#), [125](#)
- [206] Z.Y. Gao, D. Lv, W. Wang et J. Yu. Study on the dynamic magnetic behaviors in a ferrimagnetic mixed spin Ising ladder-type graphene nanoribbon. *Polymer*, 223 (2021) 123678. [123](#), [125](#)
- [207] N. Lupu, M. Lostun et H. Chiriac. Surface magnetization processes in soft magnetic nanowires. *J. Appl. Phys*, 107 (9) (2010) 09E315. [123](#)

Bibliographie

- [208] S. Bouhou, I. Essaoudi, A. Ainane, M. Saber, F. Dujardin et J. J. de Miguel. A Theoretical Study of Hysteresis Behaviors of 2D Mixed Spin-(1/2, 1) Ising Nanoparticles. *J. Magn. Mater.*, 324 (16) (2012) 2434-2441. [123](#), [125](#), [145](#)
- [209] W. Wang, L. Sun, R.D. Li, Z.Y. Gao, F. Wang et M. Tian. Dynamic magnetic behaviors of a double-layer core/shell graphene nanoribbon in a time-dependent magnetic field. *Results Phys.*, 19 (2020) 103573. [123](#), [145](#)
- [210] L. Sun, W. Wang, D. Lv, Z. Y. Gao, Q. Li et B. C. Li. Magnetic and thermodynamic behaviors of the graphene-like quantum dots: A Monte Carlo study. *J. Magn. Mater.*, 528 (2021) 167820. [125](#)
- [211] J. A. Czaban, D. A. Thompson et R. R. La Pierre. GaAs core-shell nanowires for photovoltaic applications. *Nano letters*, 9(1) (2009) 148-154. [125](#), [145](#)
- [212] D. Zhang, Z. Liu, S. Han, C. Li, B. Lei, M. P. Stewart, J. M. Tour et C. Zhou. Magnetite (Fe_3O_4) Core-Shell Nanowires: Synthesis and Magnetoresistance. *Nano Letters*, 4(11) (2004) 2151-2155. [127](#)
- [213] X. Teng, D. Black, N. J. Watkins, Y. Gao et H. Yang. Platinum-magnetite core-shell nanoparticles using a sequential synthesis. *Nano Letters*, 3(2) (2003) 261-264. [127](#)
- [214] F. Wang, R. Deng, J. Wang, Q. Wang, Y. Han, H. Zhu, X. Chen et X. Liu. Tuning up-conversion through energy migration in core-shell nanoparticles. *Nature materials*, 10(12) (2011) 968-973. [127](#)
- [215] D. V. Talapin, I. Mekis, S. Götzinger, A. Kornowski, O. Benson et H. Weller. $CdSe/CdS/ZnS$ and $CdSe/ZnSe/ZnS$ Core-Shell Nanocrystals. *The Journal of Physical Chemistry B*, 108(49) (2004) 18826-18831. [127](#)
- [216] J. Y. Park, S. W. Choi, J. W. Lee, C. Lee et S. S. Kim. Synthesis and Gas Sensing Properties of TiO_2 - ZnO Core-Shell Nanofibers. *Journal of the American Ceramic Society*, 92(11) (2009). 2551-2554. [127](#)
- [217] X. Chang, Z. Liu, B. Sun, Z. Xie, X. Zheng, J. Zheng et X. Li. $Sn - C$ binary nanocomposites for lithium ion batteries: Core-shell vs. multilayer structure. *Electrochimica Acta*, 267 (2018) 1-7. [127](#)

- [218] Y. T. Chong, D. Görlitz, S. Martens, M. Y. E. Yau, S. Allende, J. Bachmann et K. Nielsch. Multilayered core/shell nanowires displaying two distinct magnetic switching events. *Advanced Materials*, 22(22) (2010) 2435-2439. [127](#)
- [219] L. Qin, L. He, J. Zhao, B. Zhao, Y. Yin et Y. Yang. Synthesis of *Ni/Au* multilayer nanowire arrays for ultrasensitive non-enzymatic sensing of glucose. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 240 (2017) 779-784. [127](#)
- [220] Y. Tak, S. J. Hong, J. S. Lee et K. Yong. Fabrication of *ZnO/CdS* core/shell nanowire arrays for efficient solar energy conversion. *Journal of Materials Chemistry*, 19(33) (2009) 5945-5951. [127](#)
- [221] K. Xu, W. Li, Q. Liu, B. Li, X. Liu, L. An, Z. Chen, R. Zou et J. Hu. Hierarchical mesoporous *NiCO₂O₄@MnO₂* core-shell nanowire arrays on nickel foam for aqueous asymmetric supercapacitors. *Journal of Materials Chemistry A*, 2(13) (2014) 4795-4802. [127](#)
- [222] R. Masrour, A. Jabar, A. Benyoussef et M. Hamedoun. Magnetic properties of cluster dendrimers of core/shell with mixed spins $\sigma = 3/2$ and $S = 2$: A Monte Carlo study. *Chemical Physics Letters*. 691 (2018) 199-205. [127](#)
- [223] M. Boughrara, M. Kerouad et A. Zaim. Phase diagrams and magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire: Monte Carlo and effective field treatments. *Journal of magnetism and magnetic materials* 368 (2014) 169-179. [127](#), [132](#), [133](#), [134](#), [139](#)
- [224] X. Wang, D. D. Chen, D. Lv, J. P. Liu, Q. Li et Z. Peng. Monte Carlo study of magnetic and thermodynamic properties of a ferrimagnetic Ising nanoparticle with hexagonal core-shell structure. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 108 (2017) 39-51. [127](#), [132](#), [133](#), [134](#), [139](#)
- [225] W. Wang, Y. Liu, Z. Y. Gao, X. R. Zhao, Y. Yang et S. Yang. Compensation behaviors and magnetic properties in a cylindrical ferrimagnetic nanotube with core-shell structure: A Monte Carlo study. *Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 101 (2018) 110-124. [127](#), [132](#), [133](#), [134](#), [139](#)
- [226] E. Albayrak. Core-shell structured square mixed-spin 1 and 1/2 Ising nanowire on the Bethe lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 401 (2016) 532-538. [127](#), [132](#), [133](#), [134](#), [139](#)

Bibliographie

- [227] Y. Kocakaplan et E. Kantar. Thermodynamic and magnetic properties of the hexagonal type Ising nanowire. *The European Physical Journal B*, 87(6) (2014) 1-7. [127](#), [139](#)
- [228] R. M. Francisco et J. P. Santos. Magnetic properties of the Ashkin-Teller model on a hexagonal nanotube. *Physics Letters A*, 383(11) (2019) 1092-1098. [127](#), [139](#)
- [229] H. K. Mohamad. Compensation behaviors of a ferrimagnetic Blume-Capel Ising nanowire system with core/shell structure. *Solid State Communications*, 113894 (2020). [127](#), [139](#)
- [230] M. Ertas et . Hexagonal type Ising nanowire with spin-1 core and spin-2 shell structure. *Communications in Theoretical Physics*, 64(4) (2015) 401. [127](#), [139](#)
- [231] A. Feraoun, A. Zaim et M. Kerouad. Monte Carlo study of a mixed spin (1, 3/2) ferrimagnetic nanowire with core/shell morphology. *Physica B: Condensed Matter*, 445 (2014) 74-80. [127](#), [139](#)
- [232] D. Lv, F. Wang, R. L. Liu, Q. Xue et S. X. Li. Monte Carlo study of magnetic and thermodynamic properties of a ferrimagnetic mixed-spin (1, 3/2) Ising nanowire with hexagonal core-shell structure. *Journal of Alloys and Compounds*, 701 (2017) 935-949. [128](#)
- [233] N. Maaouni, M. Qajjour, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad et W. O. Benomar. Magnetic and thermal properties of a core-shell borophene structure: Monte Carlo study. *Physica B: Condensed Matter*, 566 (2019) 63-70. [128](#)
- [234] W. Wang, Z. Peng, S. S. Lin, Q. Li, D. Lv et S. Yang. Monte Carlo simulation of magnetic properties of a ferrimagnetic nanoisland with hexagonal prismatic core-shell structure. *Superlattices and Microstructures*, 113 (2018) 178-193. [128](#)
- [235] T. Kaneyoshi. Ising nanowires with simple core-shell structure; Their characteristic phenomena. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 96 (2016) 1-9. [128](#)
- [236] Y. Benhouria, I. Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja et F. Dujardin. Thermodynamic properties and hysteresis behaviors of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Ising double walled ferrielectric nanotubes: A Monte Carlo study. *Superlattices and Microstructures*, 75 (2014) 761-774. [128](#)
- [237] J. M. Liu, H. L. Chan, C. L. Choy et C. K. Ong. Scaling of hysteresis dispersion in a model spin system. *Physical Review B*, 65(1) (2001) 014416. [128](#)

- [238] Y. Liu, W. Wang, D. Lv, X. R. Zhao, T. Huang et Z. Y. Wang. Hysteresis behaviors in a ferrimagnetic Ising nanotube with hexagonal core-shell structure. *Physica B: Condensed Matter*, 541 (2018) 79-88. [128](#)
- [239] S. Q. Yang, W. Wang, F. Wang, B. C. Li, H. J. Wu, M. Yang et J. H. Xu. Magnetic behaviors in a ternary metallic nanoisland with bilayer hexagonal core-shell structure. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 135 (2019) 109110. [128](#)
- [240] M. Gençaslan et M. Keskin. Dynamic magnetic hysteresis loop features of molecular-based magnetic materials and ferrimagnetic systems by the path probability method. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 167242 (2020). [128](#)
- [241] W. Lu, P. Xie et C. M. Lieber. Nanowire transistor performance limits and applications. *IEEE transactions on Electron Devices*, 55(11) (2008) 2859-2876. [128](#)
- [242] J. Xiang, W. Lu, Y. Hu, Y. Wu, H. Yan et C. M. Lieber. *Ge/Si* nanowire heterostructures as high-performance field-effect transistors. *nature*, 441(7092) (2006) 489-493. [140](#), [145](#)
- [243] S. Liu, G. Xu, J. Li, B. Wang, Z. Huang, Q. Chen et X. Qi. Iron-Cobalt *Bi*-Metallic Sulfide Nanowires on *Ni* Foam for Applications in High-Performance Supercapacitors. *ChemElectroChem*, 5(16) (2018) 2250-2255. [140](#), [145](#)
- [244] S. Breuer, C. Pfuller, T. Flissikowski, O. Brandt, H. T. Grahn, L. Geelhaar et H. Riechert. Suitability of *Au*-and self-assisted *GaAs* nanowires for optoelectronic applications. *Nano letters*, 11(3) (2011) 1276-1279. [142](#), [145](#)
- [245] F. Xu, P. W. Huang, J. H. Huang, R. T. Huang, W. N. Lee, T. S. Chin et Y. W. Du. (*In, Mn*) As nanowires with ultrahigh *Mn* concentration: Growth, morphology and magnetic anisotropy. *Solid state communications*, 151(2) (2011) 169-172. [142](#), [145](#)
- [246] C. F. Fleaca, I. Morjan, R. Alexandrescu, F. Dumitrache, I. Soare, L. Gavrilă-Florescu, F. Le Normand, et A. Derory. Dynamic hysteresis loops of the spin-2 bilayer Ising model. *Applied surface science*, 25(10) (2009) 5386-5390. [142](#), [145](#)
- [247] J. Sort, B. Dieny, M. Fraune, C. Koenig, F. Lunnebach, B. Beschoten et G. Güntherodt. Perpendicular exchange bias in antiferromagnetic-ferromagnetic nanostructures. *Applied physics letters*, 84(18) (2004) 3696-3698. [142](#), [145](#)
- [248] H. Gao, T. Zhang, Y. Zhang, Y. Chen, B. Liu, J. Wu, X. Liu, Y. Li, M. Peng, Y. Zhang, G. Xie, F. Zhao et H. M. Fan. Ellipsoidal magnetite nanoparticles: a new member of

Bibliographie

- the magnetic-vortex nanoparticles family for efficient magnetic hyperthermia. *Journal of Materials Chemistry B*, 8(3) (2020) 515-522. [142](#), [145](#)
- [249] N. Alon, T. Havdala, H. Skaat, K. Baranes, M. Marcus, I. Levy, S. Margel, A. Sharoni et O. Shefi. Magnetic micro-device for manipulating PC12 cell migration and organization. *Lab on a Chip*, 15(9) (2015) 2030-2036. [142](#)
- [250] K. Htoutou, A. Oubelkacem, Y. Benhouria, I. Essaoudi, A. Ainane et R. Ahuja. The Magnetic Properties of the Mixed Ferrimagnetic Ising System with Random Crystal Field. *J Supercond Nov Magn*, 30(5) (2016) 1247-1256. [144](#)
- [251] Y. Kocakaplan et E. Kantar. An effective-field theory study of hexagonal Ising nanowire: Thermal and magnetic properties. *Chin Phys B*, 23(4) (2014) 046801. [144](#)
- [252] Y. Hu, L. Liu et A. Du. Effect of cooling field strength and ferromagnetic shell shape on exchange bias in nanoparticles with inverted ferromagnetic-antiferromagnetic core-shell morphology. *physica status solidi (b)*, 247(4) (2010) 972-978. [144](#)
- [253] Y. T. Chong, D. Gorlitz, S. Martens, M. Y. E. Yau, S. Allende, J. Bachmann et K. Nielsch. Multilayered core/shell nanowires displaying two distinct magnetic switching events. *Adv Mater*, 22(22) (2010) 2435-2439. [144](#)
- [254] S. Bolisetty, J. Adamcik, J. Heier et R. Mezzenga. Amyloid directed synthesis of titanium dioxide nanowires and their applications in hybrid photovoltaic devices. *Advanced Functional Materials*, 22(16) (2012) 3424-3428. [144](#)
- [255] H. W. Wu et C. J. L. Tsai. Room temperature ferromagnetism in Mn^{+} -implanted *Si* nanowires. *J Chen Appl Phys Lett*, 90(4) (2007) 043121. [145](#)
- [256] D. Lv, W. Jiang, Y. Ma, Z. Gao et F. Wang. Magnetic and thermodynamic properties of a cylindrical ferrimagnetic Ising nanowire with core/shell structure. *Physica E*, 106 (2019) 101-113. [145](#)

ACCEPTED MANUSCRIPT

Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1,1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers

To cite this article before publication: Khadija Htoutou *et al* 2017 *Mater. Res. Express* in press <https://doi.org/10.1088/2053-1591/aa98f3>

Manuscript version: Accepted Manuscript

Accepted Manuscript is "the version of the article accepted for publication including all changes made as a result of the peer review process, and which may also include the addition to the article by IOP Publishing of a header, an article ID, a cover sheet and/or an 'Accepted Manuscript' watermark, but excluding any other editing, typesetting or other changes made by IOP Publishing and/or its licensors"

This Accepted Manuscript is © 2017 IOP Publishing Ltd.

During the embargo period (the 12 month period from the publication of the Version of Record of this article), the Accepted Manuscript is fully protected by copyright and cannot be reused or reposted elsewhere.

As the Version of Record of this article is going to be / has been published on a subscription basis, this Accepted Manuscript is available for reuse under a CC BY-NC-ND 3.0 licence after the 12 month embargo period.

After the embargo period, everyone is permitted to use copy and redistribute this article for non-commercial purposes only, provided that they adhere to all the terms of the licence <https://creativecommons.org/licences/by-nc-nd/3.0>

Although reasonable endeavours have been taken to obtain all necessary permissions from third parties to include their copyrighted content within this article, their full citation and copyright line may not be present in this Accepted Manuscript version. Before using any content from this article, please refer to the Version of Record on IOPscience once published for full citation and copyright details, as permissions will likely be required. All third party content is fully copyright protected, unless specifically stated otherwise in the figure caption in the Version of Record.

View the [article online](#) for updates and enhancements.

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60

Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1,1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers

K. Htoutou^{1,2}, B. Nmaila¹, M.Madani^{1,2}, L. B. Drissi^{1,3} , R. Ahl Laamara^{1,2,3}

Abstract

Thermodynamic properties and hysteresis loops of an hexagonal mixed spin-1 and spin-1/2 Ising ferrimagnetic nanowire with alternate layers are studied. Using Monte Carlo Simulation techniques, we investigate the effect of both crystal and external longitudinal fields, and interlayer coupling on the critical temperature, total magnetization, susceptibility, specific heat, internal energy and hysteresis loops. The effect of temperature on hysteresis loops is also examined. The obtained results show that the system does not exhibit compensation behavior, the phase diagram present second-order phase transitions and the triple hysteresis behavior appears depending on physical parameters.

Keywords: Thermodynamic properties, Hysteresis loop, Nanowires, Alternate layers, Mixed system, Ising model, Monte Carlo simulation

I. INTRODUCTION

In the recent few years, magnetic materials with nanometric structure such as nanoparticles, nanofilms, nanowires and nanotubes have attracted considerable attention. Their strong fraction of surface atoms inducing a high reactivity and their magnitude order dimension, allow them to present novel properties compared to the classical materials [1]. Experimentally, the most synthesized nanostructures are magnetic nanowires such as FeCo [2, 3], Fe-Pt and Fe-Ni [4, 5], Co-Pt and Co-Cu [6–8].

The number of theoretical study, focussing on nanostructures in phase transitions and their potential applications in modern technology, has increased using many system models for different morphology and combinations of spin mixtures [9]–[13]. Mixed spin Ising systems remain among the good models to examine the ferrimagnetic materials. The significative results recorded have improved by the use of various theoretical and numerical techniques, such as, effective field theory (EFT) with correlations [14]–[16], mean field approximation (MFA) [17]–[19] and monte carlo (MC) simulations [20, 21].

Using MC calculations, a number of characteristic results are obtained in mixed ferrimagnetic nanostructures, such as tricritical and compensation behavior that is of great technological importance, mainly in the process of writing and erasing in high density magneto-optical devices [22, 23]. Recently, critical and compensation temperatures were reported for core-shell (1/2, 1) nanoribbon with antiferromagnetic intermediate coupling [24]. Finite temperature phase diagrams with tricritical points were found in [25] for mixed (1, 3/2) ferrimagnetic systems with different single-ion anisotropies. The analysis of the effects of magnetic and crystal fields, couplings, temperature and size of (1/2, 1, 3/2) hexagonal core-double shell graphyne shows that the system exhibits zero, one and two compensation temperatures [26]. Moreover, two new magnetization profiles V and W, that are not classified in the Néel classification nomenclature, were observed and the presence of triple and quadruple hysteresis loops in antiferromagnetic case was reported [26].

Triple hysteresis loop has also been found in molecular based magnetic materials using MCs and EFT with correlations [27]–[28]. Hysteresis behaviors of core/shell magnetic nanostructures has been also investigated by employing EFT with correlations [29, 30]. Usually, the triple hysteresis loops appears at low temperature depending on the magnetic and crystal fields, shell interactions and antiferromagnetic interface coupling. This property is very

useful in multi state memory devices [31, 32]. Furthermore, the dynamic behavior of the nanostructures are also investigated by the use of EFT [33]-[35] and MFA [36, 37].

Our aim in paper is to study the phase diagrams, the thermodynamic properties and hysteresis loops of a ferrimagnetic hexagonal mixed spin-(1,1/2) nanowire with alternate layers. The numerical results are obtained using the Monte Carlo Simulation (MCS) based on Metropolis algorithm. As far we know, such a study has not been carried out. In particular, attention is paid to the effect of longitudinal crystal field and the interlayer exchange coupling on the critical temperature and on the hysteresis loops. The thermodynamic quantities, such as, the total magnetization, the susceptibility, the specific heat and the internal energy are calculated for antiferromagnetic case. The choice of physical parameters and system is not arbitrary. The longitudinal crystal field results of the effect of a single-ion term acting only on the spin-1 atoms. The external longitudinal magnetic field was introduced for studying the Hysteresis loops. It is well known that magnetic field is an important physical parameter has great influence on magnetic properties of materials. Its application in the different synthesis and assembly methods, is similar to conventional reaction conditions such as temperature, pressure and surfactant. In recent years, magnetic field has been widely employed as a new parameter for synthesis and assembly of hexagonal and special structures, such as magnetic NiFe/Au barcode nanowires with self-powered motion [38, 39], $[\text{FeCoCu}(y)/\text{Cu}(x)]_{10}$ and $\text{Fe}_{30}\text{Co}_{64}\text{Cu}_6$ multilayer nanowires [40, 41], $\text{Fe}_{48}\text{Co}_{52}$ and Ni-Co Nanowire Arrays [42, 43], $\text{Fe}_3\text{Ge}/\text{Si}$ intermetallic compound [44] Fe_{1-x}S nanowires [45], $\text{Co}_{90}\text{Pt}_{10}$ nanotubes and nanowires [7], Ultrafine Fe-Co and Mn-Si nanowires [46, 47].

The work is organized as follows: in Section 2, we briefly describe the model and give the formulation within the Monte Carlo simulation. In section 3, we present the results and discussions. A concise conclusion is given in section 4.

II. MODEL AND FORMALISM

This work is devoted to study a ferrimagnetic hexagonal nanowire composed of alternate spin-1/2 ferromagnetic σ -layers and spin-1 ferromagnetic S-layers as displayed in Fig.1. The Hamiltonian of the system is given by the following expression:

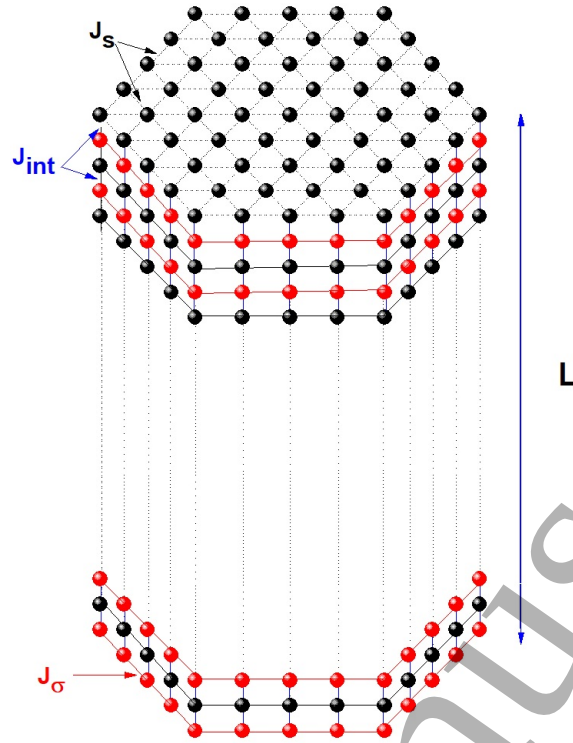


Fig. 1

FIG. 1: The three-dimensional hexagonal nanowire with alternate layers; S-layers of spin-1 and σ -layers of spin-1/2.

$$\begin{aligned}
 H = & -J_s \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} - J_\sigma \sum_{\langle nm \rangle} \sigma_{nz} \sigma_{mz} - J_{int} \sum_{\langle in \rangle} S_{iz} \sigma_{nz} \\
 & -D \sum_i (S_{iz})^2 - h(\sum_i S_{iz} + \sum_n \sigma_{nz})
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

where $S_{iz} = \pm 1, 0$ and $\sigma_{nz} = \pm \frac{1}{2}$ denote the z component of spin corresponding to site i and n , respectively. J_s and J_σ are the exchange interaction parameters between two nearest-neighbor spins at the S-layer and the σ -layer. J_{int} is the antiferromagnetic exchange interaction between the spins of S-layer and σ -layer in the interface. The three first summation express respectively the summation over all pairs of neighboring spins at S-layer, σ -layer and the interface. D denotes the strength of a single-ion term acting only on the spin-1 of S-sublattice, it causes anisotropy of the system because S^2 takes two values 1 or 0, which is not the case for spin-1/2. h is the external longitudinal magnetic field.

In the Monte Carlo calculations based on Metropolis algorithm [48], the periodic boundary conditions are applied along z -direction which is of finite thickness L . However, free

boundary conditions are applied in the x and y -directions. The simulations are carried out for $N.L$ spins where N is the number of spin in the nanowire crosssection and L denotes the length wire set to be 100.

The two sublattice magnetizations M_s and M_σ are defined by

$$M_s = \frac{1}{N.L/2} \langle \sum_i S_i \rangle \quad \text{and} \quad M_\sigma = \frac{1}{N.L/2} \langle \sum_n \sigma_n \rangle. \quad (2)$$

The total magnetization and the total susceptibility χ are given by:

$$M_T = \frac{(M_s + M_\sigma)}{2} \quad \text{and} \quad \chi = \beta N (\langle M_T^2 \rangle - \langle M_T \rangle^2) \quad (3)$$

with $\beta = 1/k_B T$ and k_B is the Boltzmann constant taken to be $k_B = 1$ for simplicity.

The specific heat C and the internal energy $\langle E \rangle$ of the system are:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\beta}{T} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad \text{and} \quad \langle E \rangle = \frac{1}{2.N.L} \langle H \rangle. \quad (4)$$

At the compensation point, the total polarization must vanish. Then, the compensation temperature can be determined by the crossing point between the absolute values of the sublattice magnetizations M_s and M_σ .

In our calculations, the Monte Carlo steps per spin (MCS) are supposed to vary between 2×10^5 and 4×10^5 at each temperature. MCS are used for computing averages of thermodynamic quantities after that 10^5 initial MCS have been discarded to achieve equilibrium.

III. RESULTS AND DISCUSSION

This section reports the main results obtained for the mixed spin- $\frac{1}{2}$ and spin-1 Ising nanowire with two alternate layers. For the sake of simplicity, reduced exchange interactions $R_1 = J_\sigma/J_s$ and $R = J_{int}/J_s$ are used.

Fig.2 plots the influence of longitudinal crystal field on critical temperature for selected values of antiferromagnetic interlayer coupling R . As shown in phase diagram $(T, D/J_s)$, the nanowire only undergoes a second-order phase transition and the critical temperature increases with absolute value of R .

In the absence of crystal and external magnetic fields, Figs.3 (a-e) show the temperature dependence of the total magnetization, the two σ -layer and S -layer magnetizations (M_s and M_σ), the total susceptibility, the specific heat and the internal energy for negative selected

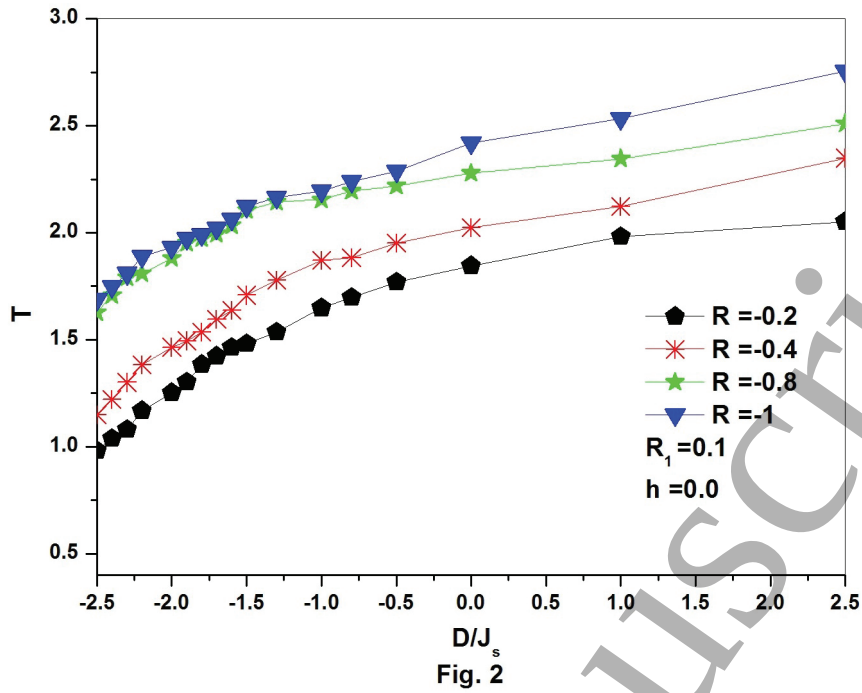


FIG. 2: The phase diagrams of the system in the $(T, D/J_s)$ plane for $R_1 = J_\sigma/J_s = 0.1$ and for $R = J_{int}/J_s = -0.2, -0.4, -0.8$ and $R = -1.0$

values of exchange interactions $R = -0.2, -0.4, -0.8$ and -1.0 . Fig.3a reveals that the total ferrimagnetic magnetization M_T , that is negative, increases to vanish beyond the critical temperature for different values of R . Furthermore, the critical temperature increases with the increasing of the antiferromagnetic exchange coupling R . It follows that no compensation behavior is found in these cases. In Fig.3b, one can observe that, as the temperature increases, the S-layer magnetization increases from its minimum value -1 , whereas, the σ -layer magnetization decreases monotonically from the saturation values 0.5 . Moreover, the two magnetizations M_σ and M_s vanish at the critical temperature T_c that increases with increasing the antiferromagnetic exchange coupling R . The same behavior is clearly observed in Fig.3c-d for the total susceptibility and the specific heat as the corresponding curves present one peak at the critical temperatures. When increasing the antiferromagnetic exchange interactions R , the peaks move to large temperature values. Finally, the total internal energy that is minimal at low temperature, increases abruptly near the critical temperature as depicted in Fig.3e, and continues increasing slowly increases to its maximum at higher temperatures. With the increasing of the antiferromagnetic exchange interactions R , the internal energy decreases.

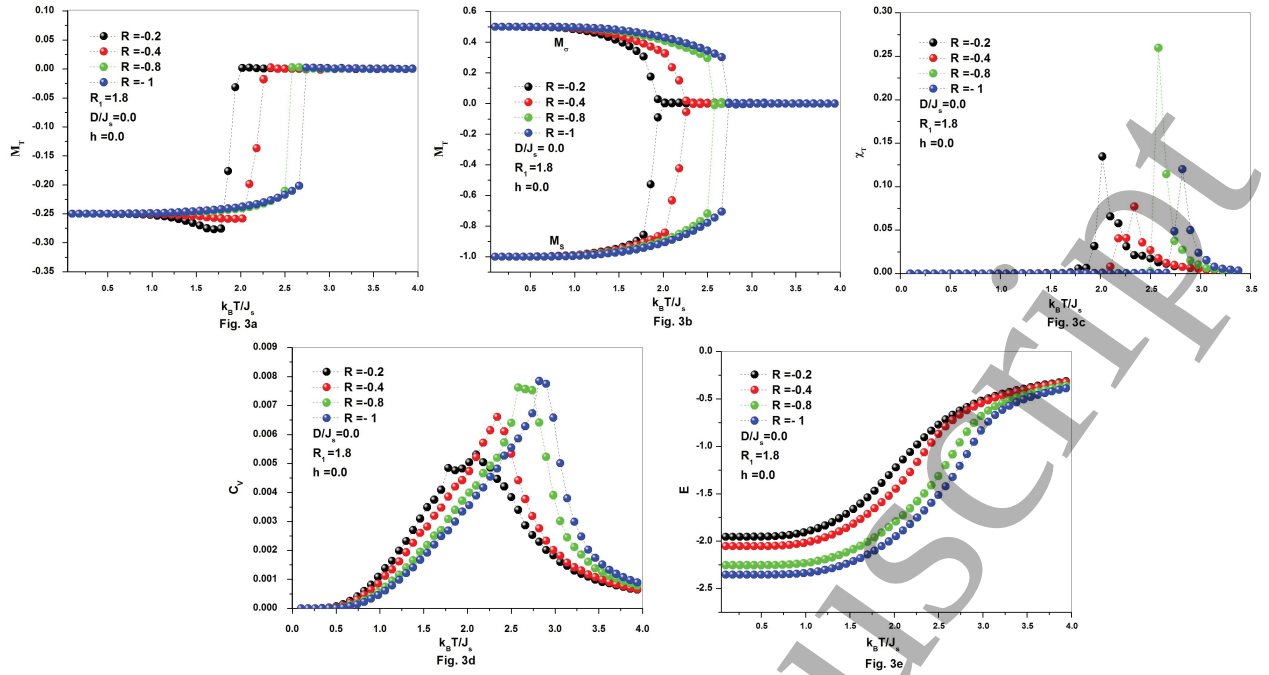


FIG. 3: Temperature dependence of the total longitudinal magnetization (a), the S-layers of spin-1 and -layers of spin-1/2 magnetizations (b), the total magnetic susceptibility (c), specific heat (d) and the total internal energy (e) of a mixed spin-(1, $\frac{1}{2}$) Ising ferrimagnetic nanowire with alternate layers for selected negative values of the interlayer exchange coupling R , in absence of the crystal and external longitudinal fields. The value of the exchange interaction R_1 of -layers are fixed at $R_1 = 1.8$.

For selected values of the antiferromagnetic exchange interactions, Figs.4(a-e) present the effect of crystal field on the different parameters of our system. First of all, one can easily deduce that no compensation behavior is found. The ferromagnetic magnetizations M_σ and M_s and the total ferrimagnetic M_T exhibit a second order phase transition. The associated curves indicate that the critical temperature increases with increasing D . The three χ_T , χ_s and χ_σ susceptibility profiles, depicted in Fig.4c, indicate a similar effect of D on the three susceptibilities that the exchange interactions reported above. Indeed; the curves present a peak at critical temperature T_c , and their behavior is the same as that of the magnetizations. The thermal variations of the specific heats C_T , C_s and C_σ exhibit one peak at T_c , whose positions depend on the values of D . It moves to large temperature values with increasing D . The effect of D on the internal energies E_T , E_s and E_c shows a decrease with D at low temperature followed by an abrupt increase in the vicinity of the critical temperature.

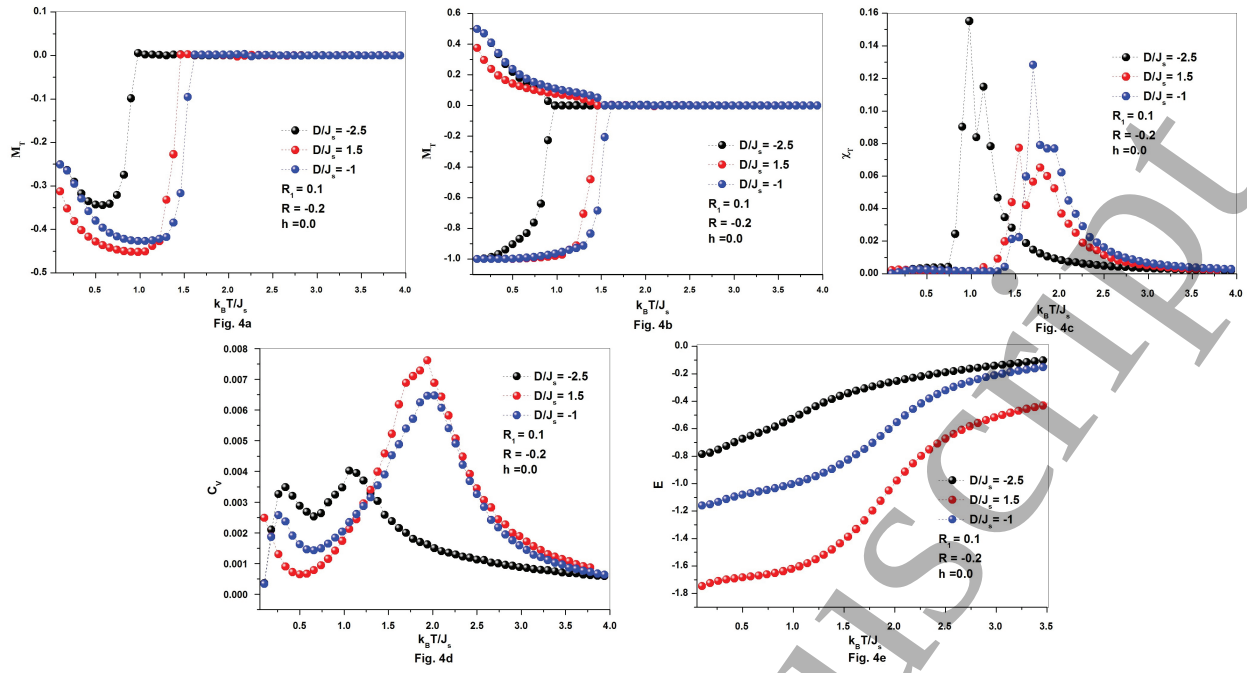


FIG. 4: Temperature dependence of the total longitudinal magnetization (a), the S-layers of spin-1 and -layers of spin-1/2 magnetizations (b), the total magnetic susceptibility (c), specific heat (d) and the total internal energy (e) of a mixed spin-(1, $\frac{1}{2}$) Ising ferrimagnetic nanowire with alternate layers for selected negative values of D/J_c . The value of the interaction exchange coupling R and R_1 are fixed at $R = -0.2$ and $R_1 = 0.1$.

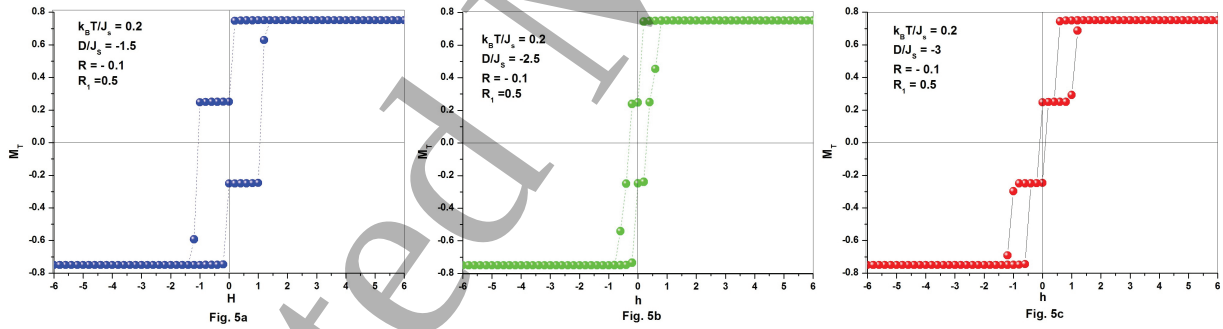


FIG. 5: The applied longitudinal field h dependence of the total magnetization for specific values of the crystal field D/J_s

To study the effect of the crystal field on the hysteresis loops of the system, Fig.5 exhibits the total ferrimagnetic magnetization curves versus the applied external longitudinal field at $T = 0.2$, $R = -0.1$ and $J_\sigma = 0.5$. The (M_T-h) ferrimagnetic hysteresis loops are obtained by changing cyclically the value of longitudinal field h for selected values of the crystal field

D/J_s . The magnetization curves show a symmetric behavior for both positive and negative longitudinal fields. By increasing the absolute value of crystal field, the number of steps rises. Moreover, when $D/J_s \leq -3.0$, the hysteresis presents three loops and this number of loops decreases with increasing the crystal field value. Notice that the multiple hysteresis loops is mainly due to the competition between the σ -layer and S -layer exchange interactions, the external longitudinal fields and the thermal fluctuations in good agreement with [26].

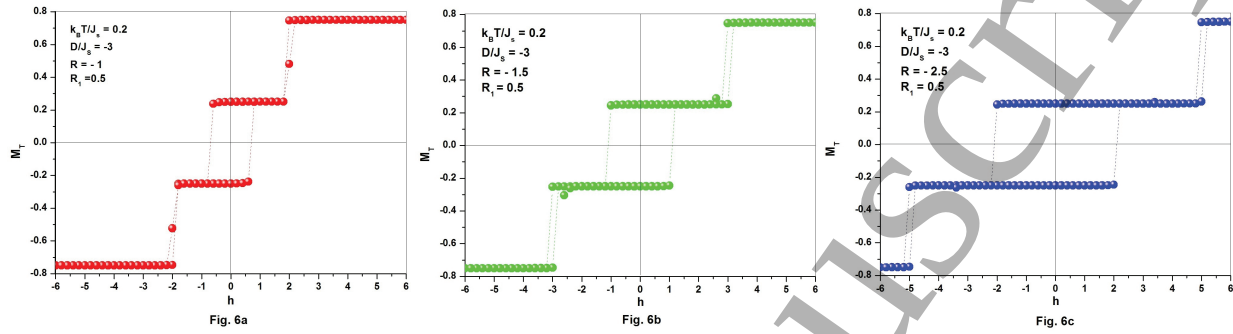


FIG. 6: Hysteresis loops of mixed spin-(1, 1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers in term of antiferromagnetic exchange interaction $R = J_{int}/J_s$.

At fixed values of $k_B T/J_s = 0.2$, $D/J_s = -3.0$ and $J_\sigma/J_s = 0.5$, Fig.6 displays the effect of the interlayer exchange coupling R on the hysteresis behaviors of the system. With the increase of the antiferrimagnetic exchange coupling, the extremity loops become narrower and the central hysteresis (coercive field) becomes wider.

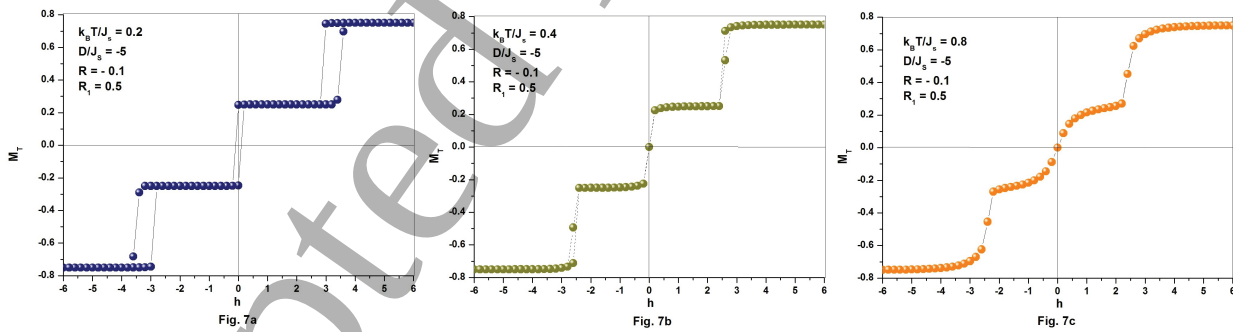


FIG. 7: Total magnetization as function of applied longitudinal field h for different values of the temperature $k_B T/J_s$.

Finally, Fig.7 illustrates the hysteresis properties when changing the value of the temperature T for fixed values of $D/J_s = -5.0$, $R = -0.1$ and $J_\sigma/J_s = 0.5$. At low temperature, the magnetization of the system exhibits a triple hysteresis loops. However, the number

of loops becomes narrower and disappears with the increasing of the temperature. In this case, the multiple hysteresis loops are mainly due to the competition between the interlayer exchange interactions, the external magnetic fields and the thermal fluctuations [26].

IV. CONCLUSION

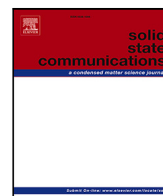
In conclusion, thermodynamic properties and hysteresis behaviors of a hexagonal mixed spin-1 and spin-1/2 Ising ferrimagnetic nanowires with alternate layers are studied by the mean of Monte Carlo simulations. The influence of the crystal field and the interlayer exchange coupling on the critical temperature and on the hysteresis loops are investigated. The thermodynamic quantities, such as, the total magnetization, susceptibility, specific heat and the internal energy are calculated for different cases. The ferrimagnetic nanowire model does not exhibit a compensation behavior and undergoes a second-order phase transition. Another important finding is the observation of triple hysteresis loops at low temperatures. The number of the loops decreases with the increase of temperature and crystal field and also with the decrease in the absolute value of interlayer exchange coupling.

Acknowledgement 1 *The authors would like to acknowledge financial support from the Centre National pour la Recherche Scientifique et Technique (CNIRST)-Morocco.*

-
- [1] A.E. Berkowitz, R.H. Kodama, S.A. Makhlof, F.T. Parker, F.E. Spada, E.J. Mc Niff, Jr.S. Foner, J.Magn.Magn.Mater.**196** (1999) 591
 - [2] H.L. Su, G.B. Ji, S.L. Tang, Z. Li, B.X. Gu, Y.W. Du, Nanotechnology **16** (2005) 429
 - [3] L. Elbaile, D.R. Crespo, V. Vega, J.A. García, Journal of Nanomaterials **2012** (2012) 198453
 - [4] J.P. Xu, Z.Z. Zhang, B. Ma, Q.Y. Jin, J. Appl. Phys. **109** (2011) 07B704
 - [5] C. Rousse, P. Fricoteaux, J. Mater. Sci. **46** (2011) 6046
 - [6] W. Chen, Z. Li, G.B. Ji, S.L. Tang, M. Lu, Y.W. Du, Solid State Commun. **133** (2005) 235
 - [7] J.Y. Chen, H.R. Liu, N. Ahmad, Y.L. Li, Z.Y. Chen, W.P. Zhou, X.F. Han, J. Appl. Phys.**109** (2011) 07E157
 - [8] Z. H. Yang, Z. W. Li, L. Liu, L. B. Kong, J. Magn. Magn. Mater. **323** (2011) 2674

- [9] C. Alexiou, A. Schmidt, R. Klein, P. Hullin, C. Bergemann, W.J. Arnold, *Magn. Magn. Mater.* **252** (2002) 363
- [10] G.V. Kurlyanskaya, M.L. Sanchez, B. Hernando, V.M. Prida, P. Gorria, M. Tejedor, *Appl. Phys. Lett.* **82** (2003) 3053
- [11] H. Zeng, J. Li, J.P. Liu, Z.L. Wang, S. Sun, *Nature* **420** (2002) 395
- [12] D.W. Elliott, W.X. Zhang, *Environ. Sci. Tech.* **35** (2001) 4922
- [13] R H. Kodama, *J. Magn. Magn. Mater.* **200** (1999) 359
- [14] E. Kantar, Y. Kocakaplan, *Solid State Commun.* **177** (2014) 1
- [15] Y. Kocakaplan, E. Kantar, *Eur. Phys. J. B* **87** (2014) 135
- [16] M. Ertaş, E. Kantar, Chinese Physical Society and IOP Publishing Ltd, *Communications in Theoretical Physics* **64** (2015).
- [17] T. Kaneyoshi, J.C. Chen, *J. Magn. Magn. Mater.* **98** (1991) 201
- [18] J.A. Plascak, *Physica A* **198** (1993) 665
- [19] M. Keskin, M. Ertaş, *J. Stat. Phys.* **139** (2010) 333
- [20] Y. Yüksel, E. Aydiner, H. Polat, *J. Magn. Magn. Mater.* **323** (2011) 3168
- [21] N.De La Espriellaa, C.A.Mercadob, G.M.Buendíac, *J. Magn. Magn. Mater.* **417** (2016) 30
- [22] T. Kaneyoshi, J.C. Chen, *J. Magn. Magn. Mater.* **98** (1991) 201
- [23] L. Ertl, G. Endl, H. Hoffmann, *J. Magn. Magn. Mater.* **113** (1992) 227
- [24] L. B. Drissi, S. Zriouel, L. Bahmad, *J. Magn. Magn. Mater.* **374** (2015) 639
- [25] A. Bobak, O.F. Abubrig, D. Horvath, *J. Magn. Magn. Mater* **246** (2002) 177
- [26] L. B. Drissi, S. Zriouel, *Stat. Mech.* (2016) 053206
- [27] W. Wang, W. Jiang, D. Lv, *Phys. Stat. Soli. (b)* **249** (2012) 190
- [28] A. Razouk, M. Sahlaoui, M. Sajieddine, *J Supercond Nov Magn* **25** (2012) 1623
- [29] M. Keskin, N. Sarli, B. Deviren, *Solid State Commun.* **151** (2011) 1025
- [30] S. Bouhou, I. Essaoudi, A. Ainane, A. Oubelkacem, R. Ahuja, F. Dujardin, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **28** (2015) 885
- [31] W. Jiang, V. Cheong Lo, B. D. Bai, J. Yang, *Physica A* **389** (2010) 2227
- [32] S. Bouhou, I. Essaoudi, A. Ainane, M. Saber, F. Dujardin, J. J. de Miguel, *J. Magn. Magn. Mater.* **324** (2012) 2434
- [33] B. Deviren, E. Kantar, M. Keskin, *J. Magn. Magn. Mater.* **324** (2012) 2163
- [34] M. Ertaş, Y. Kocakaplan, *Phys. Lett. A* **378** (2014) 845

- [35] E. Kantar, M. Ertas, M. Keskin, J. Magn. Magn. Mater. **361** (2014) 61
- [36] G.M. Buendía, E. Machado, Phys. Rev. E **58** (1998) 1260
- [37] M. Keskin, O. Cankö, Y. Polat, J. Korean Phys. Soc. **53** (2008) 497
- [38] B.C. Park, Y.K. Kim, Met. Mater. Int. **23** (2017) 413
- [39] I.T. Jeon, S.J. Yoon, B.G. Kim, J.S. Lee, B.H. An, J. S. Ju, J.H. Wu, Y.K. Kim, J. Appl. Phys. **111** (2012) 07B513
- [40] E.M. Palmero, C. Bran, R.P. del Real, M. Vázquez, J. Phys. Conf. Series **755** (2016) 012001
- [41] E.M. Palmero, C. Bran, R. P. del Real, C. Magen, M. Vazquez, IEEE Magn. Lett. **5** (2014) 6700304
- [42] H.L. Su, S.L. Tang, R. L. Wang, Y.Q. Chen, C. Jia, Y.W. Du, Chin. J. Chem. Phys. **22** (2009) 27
- [43] E.M. Palmero, C. Bran, R. P. del Real, C. Magen, M. Vázquez, J. Appl. Phys. **116** (2014) 033908
- [44] K.V. Shanavas, M. A. McGuire, D. S. Parker, J. Appl. Phys. **118** (2015) 123902
- [45] M. Nath, A. Choudhury, A. Kundu, C.N.R. Rao, Adv. Mater. **15** (2003) 2098.
- [46] X. Lin, G. Ji, T. Gao, X. Chang, Y. Liu, H. Zhang, Y. Du, Solid State Commun. **151** (2011) 1708
- [47] H. W. Wu, C.J. Tsai, and L.J. Chen, Appl. Phys. Lett. **90** (2007) 043121
- [48] K. Binder (ed.): Monte Carlo Methods in Statistical physics. Springer, Berlin (1991)



Full length article

The magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-(3/2,2) hexagonal Ising nanowire system with alternate layers

B. Nmaila^{a,*}, K. Htoutou^{a,b}, L.B. Drissi^{a,c}, R. Ahl Laamara^{a,c}^a LPHE, Modeling & Simulations, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Morocco^b CRMEF, Centre Régional des Métiers de l'Éducation et de la Formation, Fes-Meknes, Morocco^c CPM, Centre of Physics and Mathematics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Communicated by T. Kimura

Keywords:

Ferrimagnetic
Ising model
Nanowires
Mixed system
Magnetic properties
Hysteresis loops
Compensation temperature
Monte Carlo simulation

ABSTRACT

In this paper, we have examined in detail the behavior of magnetic properties, hysteresis loops, and compensation phenomenon of a ferrimagnetic mixed spin-(3/2,2) hexagonal Ising nanowire with alternate layers within the Monte Carlo method based on the Metropolis algorithm. The effect of longitudinal crystal field and exchange coupling constants on the total and the sublattice magnetizations, susceptibilities, specific heat, internal energy, as well as hysteresis loops are investigated for particular parameters. The obtained results showed different interesting magnetic phenomena, such as seven and triple hysteresis loops at low temperatures, and one or double compensation temperatures under certain parameter values. Our outcomes are also compared with various experimental and theoretical studies.

1. Introduction

Recently, there has been too much research on the properties, production, and application of nanowires. This interest is due to their excellent physical properties, size, and shape at the nanoscale (10^{-9} m). There are many types of nanowires, such as metallic nanowires (Ni, Co, Pt, Au...) [1,2], semiconductor (GaAs, Si, InP, GaP...) [3,4] or dielectric nanowires (SiO_2 , high- k HfO_2 , TiO_2) [5,6], and molecular nanowires that consist of organic chains (DNA, SCMs) [7,8] or inorganic molecular wire ($\text{Mo}_6\text{S}_9\text{-xI}_x$) [9,10]. These nanoscale objects are of interest to many sectors of activity such as Medicine and the life sciences [11,12], electronics and communications [13,14], chemistry and materials [15–17], energy [18–20], multi-functional catalysts [21], high-density storage [22], medical imaging [23], solar cells [24], ultra-fast computers [25] and mechanical stability [26], room temperature superparamagnetic [27,28], environmental remediation [29], multi-state memory devices [30], nonlinear optical [31], bio-electricity [32], permanent magnets [33], magneto-resistance [34], etc...

The physical properties such as magnetic and thermodynamic behavior of several ferrimagnetic mixed spin systems, such as (1, 1/2) [35, 36], (3/2, 1) [37,38], (3/2, 2) [39] and (5/2, 3/2) [40,41] were investigated in details using various theoretical and numerical methods, such as the Monte Carlo Simulation (MCS) [42,43], the Mean-Field Approximation (MFA) [44,45], the Effective-Field Theory with correlations

(EFT) [46,47], the Glauber-Type Stochastic Dynamics Approach based on the effective-field theory [48], the Blume–Capel Method [49], the Dynamic Effective-Field Theory (DEFT) [50], and the Green's Function Technique [51]. Among the theoretical studies, the critical and compensation temperatures of a mixed spin (5/2, 2) ferrimagnetic Ising model with the nearest and next-nearest neighbors exchange couplings was calculated by J.L. Bi et al. [52] within (MCS). Using the same method L.W. Jie [53] have studied a mixed spin (1/2, 2) Ising diamond chain, and compared the result with those of the (EFT). T.Kaneyoshi [54] have investigated the thermal variations and the phase diagrams of a graphene model using (EFT). Also, the thermodynamic properties and phase diagrams behavior of a mixed spin (1, 2) ferrimagnetic Ising system with single-ion anisotropy on hexagonal nanowire have been studied by M. Erta et al. [55] within the same methods. They have found that the total magnetization can takes Q, P, S, R and N-types characteristic of compensation behavior. Moreover, the first and second-order phase transitions are obtained under certain system parameters. The magnetic properties of graphene systems are the memes with the two (EFT) and (MCS) methods.

On the other hand, the hysteresis loops (hysteresis area, coercivity and remanence) are very important in magnetic recording media [56]. In particular, the knowledge of high-frequency hysteresis loops is useful because high-speed spin electronics have aroused special interest

* Corresponding author.

E-mail address: nmaila.badreddine@gmail.com (B. Nmaila).<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114418>

Received 31 March 2021; Received in revised form 10 June 2021; Accepted 11 June 2021

Available online 16 June 2021

0038-1098/© 2021 Elsevier Ltd. All rights reserved.

now [57]. The hysteresis behaviors have been investigated by several studies using different methods. The hysteresis loops of a mixed-spin ferrimagnetic Ising model have been investigated using (MCS) [58,59]. By (EFT), E. Kantar [60] have studied the thermal and magnetic behavior of a hexagonal Ising nanowire, and other systems [61,62]. Ü. Akıncı also [63] have studied the hysteresis loops behavior of the diluted $S = 1$ Ising Blume–Capel model within the effective field approximation. As a result, the several hysteresis loops were found for specific physical parameters.

In a recent study, we have examined a hexagonal type ferrimagnetic Ising nanowire with mixed spin- $(1/2, 1)$ and alternate-layers by mean of the (MCS) based on the Metropolis algorithm [64]. It is remarked that the compensation behavior was not found. Our interest in this paper, is to study the same nanowire system with mixed spin-2 and $3/2$. We focused more specifically, on the effect of longitudinal crystal field and the exchange interactions on the thermodynamic properties, such as the total and the two sublattice magnetizations, the total susceptibility, the specific heat, and the free internal energy, as well as the phase diagram and the hysteresis loops behaviors. The results concerned show that the system exhibits important behaviors that we examined for different physical parameters.

In the following section, we describe in detail the model and procedure of the Monte Carlo simulation technique. In the third section, the results are given and discussed. Finally, the fourth section concludes the paper.

2. Model and formalism

We considered a ferrimagnetic mixed spin $\sigma = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$ and $S = \pm 2, \pm 1, 0$ Ising nanowire in the presence of longitudinal crystal and the external magnetic fields as shown in Fig. 1. The hamiltonian describing the system is given by:

$$H = -J_S \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} - J_\sigma \sum_{\langle nm \rangle} \sigma_{nz} \sigma_{mz} - J_{int} \sum_{\langle in \rangle} S_{iz} \sigma_{nz} - D \left(\sum_i (S_{iz})^2 + \sum_n (\sigma_{nz})^2 \right) - h \left(\sum_i S_{iz} + \sum_n \sigma_{nz} \right) \quad (1)$$

Where the values of the magnetic moments take $S_{iz} = \pm 2, \pm 1, 0$ and $\sigma_{nz} = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$. For the ferromagnetic exchange interactions ones, are amongst the nearest-neighbor spins at the S -layer, σ -layer, and between S -layer and σ -layer in the interface are given by the following constants $J_{(S)}$, $J_{(\sigma)}$ and $J_{(int)}$ respectively. Where D and h are the longitudinal crystal and external magnetic fields. The Monte Carlo Simulation (MCS) based on the Metropolis algorithm [65], which is a method in statistical physics studies models, described by a test pattern is made by randomly selecting a spin, and then calculating the energy difference of the test state from the current state δE , if $\delta E \leq 0$, the test state is energetically accepted. Otherwise, a random number $0 \leq \zeta \leq 1$ is generated, and the new state is only accepted if $\exp(-\beta \delta E) > \zeta$. This condition can be rewritten as $-\beta \delta E > \log \zeta$. The MCS are performed for $N.L$ spins where N is the number of spins in the nanowire cross-section and L is the length of the wire set equal to 100. We apply the periodic boundary conditions on the Z -direction of finite thickness L , and the free boundary conditions on the XY plane.

The two sublattice magnetizations M_S and M_σ of the S -layers and the σ -layers are:

$$M_S = \frac{1}{N \cdot \frac{L}{2}} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \quad (2)$$

and

$$M_\sigma = \frac{1}{N \cdot \frac{L}{2}} \left\langle \sum_n \sigma_n \right\rangle \quad (3)$$

The total magnetization is given by:

$$M_T = \frac{(M_S + M_\sigma)}{2} \quad (4)$$

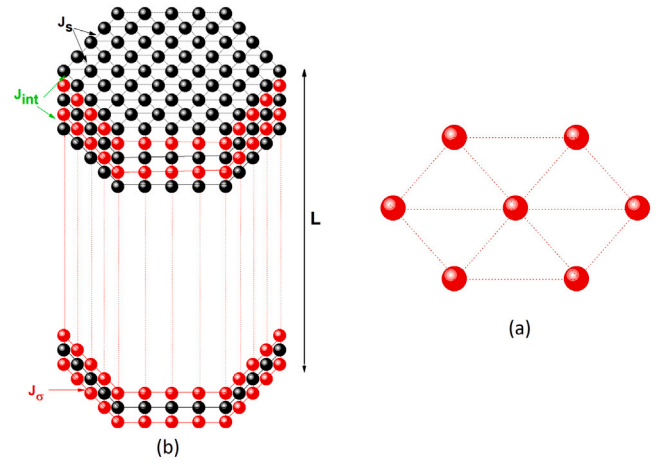


Fig. 1. (Color online) Schematic representation of hexagonal Ising nanowire with alternate layers structure; S -layers of spin-2 and σ -layers of spin- $3/2$: (a) cross-section and (b) three-dimensional. The black spheres indicate magnetic atoms (spin- $S = 2$), and the red spheres delegate magnetic atoms (spin- $\sigma = \frac{3}{2}$). $J_{(int)}$ the exchange coupling between the S -layers and σ -layers is antiferromagnetic ($R = \frac{J_{int}}{J_S} < 0$).

and the total susceptibility χ is presented by:

$$\chi = \beta N (\langle M_T^2 \rangle - \langle M_T \rangle^2) \quad (5)$$

Where $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B is the Boltzmann constant taken to be $k_B = 1$, for simplicity, and T denotes the absolute temperature.

The internal energy $\langle E \rangle$ of the system are:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2 \cdot N \cdot L} \langle H \rangle \quad (6)$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2 \cdot N \cdot L} \left\langle -J_S \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} - J_\sigma \sum_{\langle nm \rangle} \sigma_{nz} \sigma_{mz} - J_{int} \sum_{\langle in \rangle} S_{iz} \sigma_{nz} - D \left(\sum_i (S_{iz})^2 + \sum_n (\sigma_{nz})^2 \right) - h \left(\sum_i S_{iz} + \sum_n \sigma_{nz} \right) \right\rangle \quad (7)$$

The total specific heat is C_v :

$$\frac{C_v}{k_B} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\beta}{T} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (8)$$

Where k_B is Boltzmann constant. To simplify, we set $k_B = 1$.

For our information, the total magnetization becomes zero at compensation temperature T_{comp} , and the curie temperature T_c . Thus, T_{comp} could be reached with the seek of the intersection point between the most absolute values of two sublattice magnetizations using:

$$|M_S(T_{comp})| = |M_\sigma(T_{comp})| \quad (9)$$

and

$$\text{sign}(M_S(T_{comp})) = -\text{sign}(M_\sigma(T_{comp})) \quad (10)$$

With $T_c > T_{comp}$. In this work, we can determine T_c from the maximum at the specific and the total susceptibility heat curve of the system.

At each temperature, the Data are obtained between -3×10^5 and 2×10^5 Monte Carlo steps (MCS) per spin, which are used for determining averages of thermodynamic quantities after discarding 10^5 initial (MCS) for equilibration.

3. Results and discussion

Firstly, we check the effects of the longitudinal crystal field D , the external magnetic field h , the exchange interaction J_σ and the antiferromagnetic exchange interaction J_{int} on the magnetic properties such as total longitudinal magnetization, total susceptibility, total specific

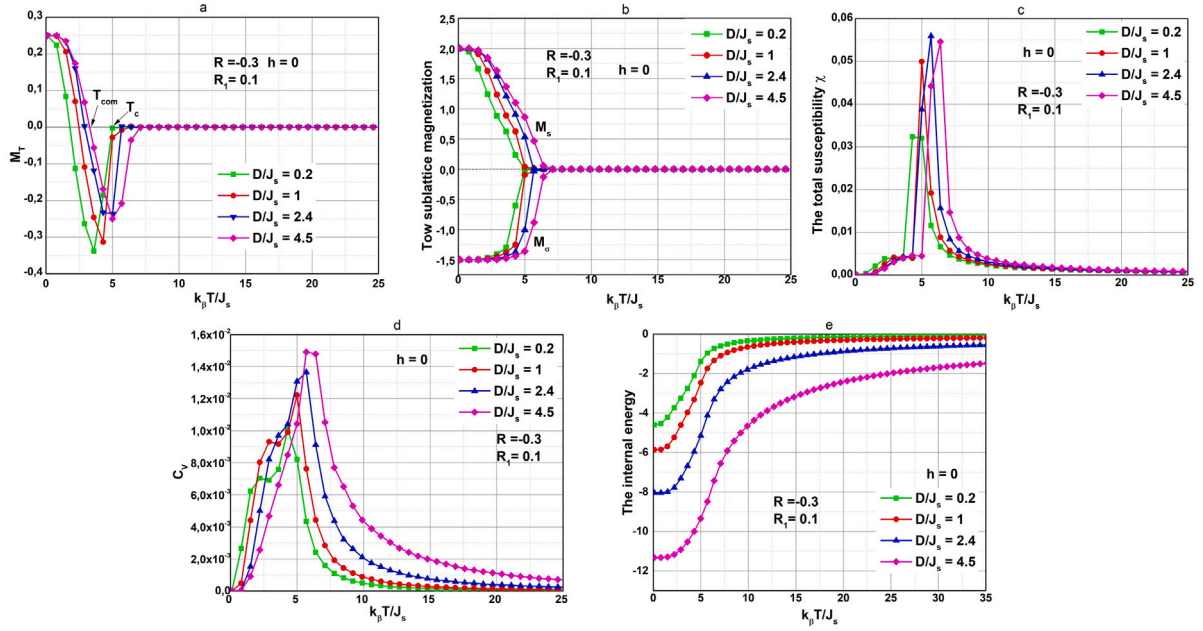


Fig. 2. (Color online) The influence of temperature on the total magnetization M_T , (a), the sublattice S -layer and σ -layer magnetizations (M_σ and M_S) (b), the total magnetic susceptibility χ (c), the specific heat (d) and the free internal energy (e) of a hexagonal Ising ferrimagnetic nanowire with alternate for selected positive values of ($D = 0.2, 1.0, 2.4, 4.5$), with fixed values $h = 0.0$, $R = -0.3$, and $R_1 = 0.1$.

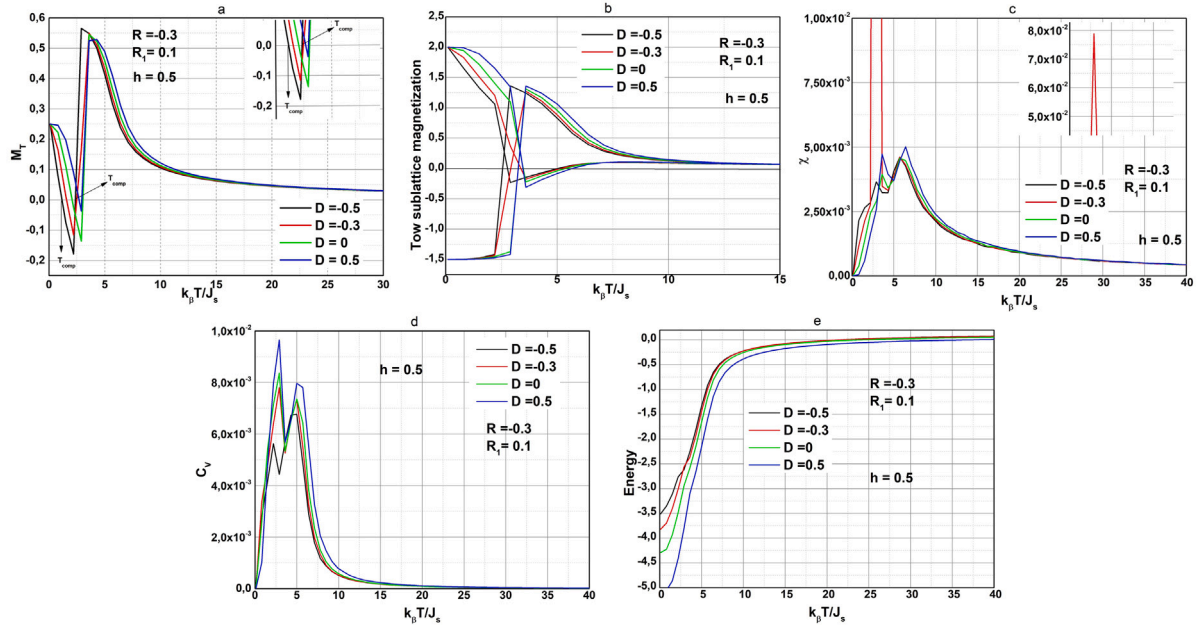


Fig. 3. (Color online) The influence of temperature on the total magnetization M_T , (a), the sublattice S -layer and σ -layer magnetizations (M_σ and M_S) (b), the total magnetic susceptibility χ (c), the specific heat (d) and the free internal energy (e) of a hexagonal Ising ferrimagnetic nanowire with alternate layers for selected values of ($D = -0.5, -0.3, 0.0, 0.5$), with fixed values $h = 0.5$, $R = -0.3$, and $R_1 = 0.1$.

heat, and internal energy, with various physical parameters. We also examined the compensation and the critical phenomenon, as well as the variations of the hysteresis loops.

To explain the ferrimagnetic Ising model nanowire, we take $k_B = 1$ and $J_S = 1$, and reduce exchange interactions $R = \frac{J_{int}}{J_S}$ and $R_1 = \frac{J_\sigma}{J_S}$.

In Fig. 2(a–e), we show the total thermal magnetization M_T , the two sublattice magnetizations (M_S and M_σ), the total magnetic susceptibility, the specific heat, and the internal free energy for various positive values of the longitudinal crystal field D , when $h = 0$, $R = -0.3$, and $R_1 = 0.1$. The effect of the temperature on the total magnetization M_T for selected positive values of the $D = 0.2, 1, 2.4, 4.5$ has been plotted

in Fig. 2(a). We can observe that the total magnetization curves exhibit two successive zeros. The first one corresponds to the compensation temperature T_{com} , and the second corresponds to the critical temperature T_c (or ferrimagnetic–paramagnetic transition). Both temperatures varies with values of D . It is noted that the total magnetization M_T of the system exhibits standard shape N-type behavior. In Fig. 2(b), we remark that the S -layer magnetization M_S decreases from the maximum value $M_S = 2$, in parallel, the σ -layer magnetization M_σ increases monotonically from the minimum value of $M_\sigma = -1.5$. Furthermore, these M_S and M_σ disappear at critical temperature T_c . T_c increases simultaneously with D to $D = 4.5$. For Fig. 2(c–d), the same results

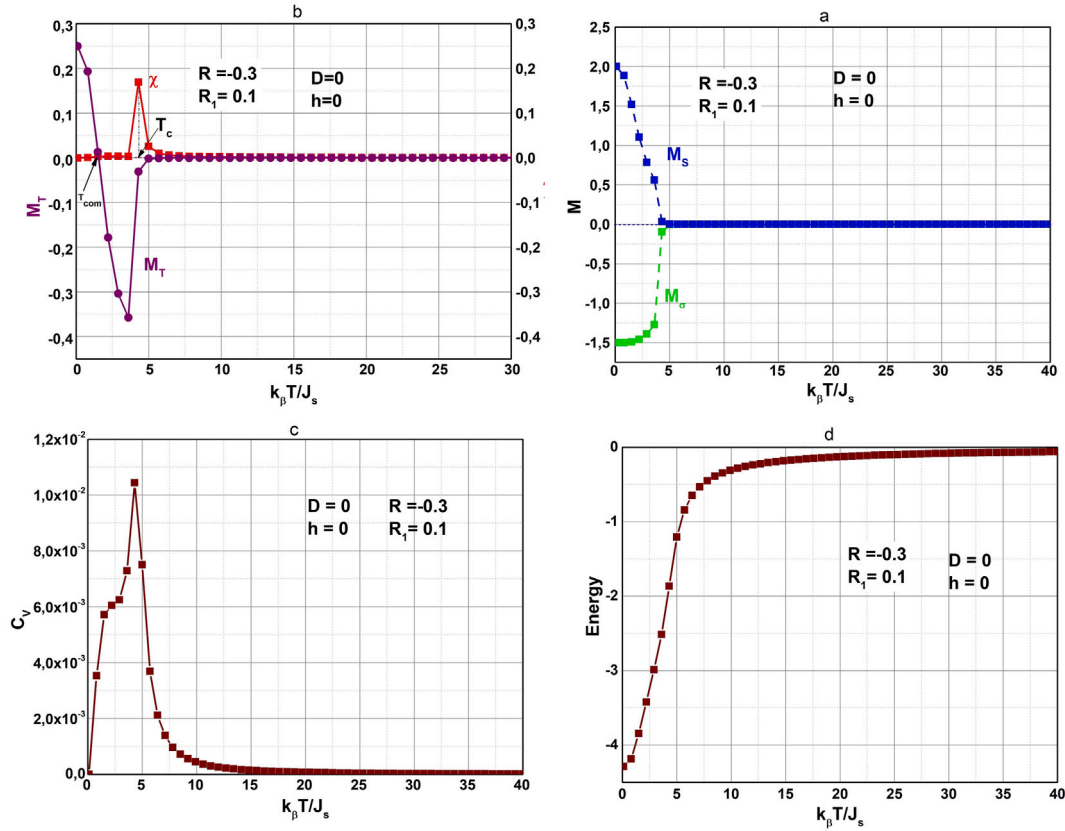


Fig. 4. (Color online) The influence of temperature on the sublattice S -layer and σ -layer magnetizations (M_σ and M_S) (a), the total magnetization M_T , and the total magnetic susceptibility (b), the specific heat (c) and the free internal energy (d) of a hexagonal Ising ferrimagnetic nanowire with alternate layers for fixed values $h = 0.0$, $D = 0.0$, $R = -0.3$, and $R_1 = 0.1$.

were confirmed for the total susceptibility χ_T and the specific heat C_v , respectively. The curves are composed of two peaks in the vicinity of T_{com} and T_c , therefore, these peaks increase with temperature when the D increases to $D = 4.5$. The influence of temperature on the internal energy of this nanowire for various values of D ($D = 0.2, 1, 2.4, 4.5$) has been presented in Fig. 2(e). Thus, the internal energy is very minimal at low temperatures and increases sharply next to T_c of the system. It is understood that there is a fluctuation at the T_{com} which corresponds to the second-order phase transition. If we decrease the values of crystal field D to 0.2, we can see that the internal energy increases. This result is important for the values of the temperatures below T_c . This results have been obtained during the study of the rectangle with core-shell ferrimagnetic mixed-spin ($3/2, 2$) Ising nanoribbon by MC [66].

In Fig. 3(a–e), with fixed values $h = 0.5$, $R = -0.3$, $R_1 = 0.1$, and selected values of ($D = -0.5, -0.3, 0.0, 0.5$). We investigated the behavior of the thermal variations of the total and sublattice magnetizations, the total susceptibility, the specific heat, and the internal energy. In Fig. 3(a), the double compensation and the critical behaviors have been detected at negative and positive values of (D). This type of behavior of the compensation point has been seen in [66–68]. We can clearly see that the shape of total magnetization shifts to N-type behavior. Fig. 3(b), plot the M_S and M_σ magnetizations. When longitudinal crystal field increases to $D = 0.5$ the intersection point between the sublattice M_S and M_σ magnetizations curves can be found, corresponding to the T_{com} . Namely, M_S and M_σ magnetizations disappeared at T_c . In Fig. 3(c–d), the curves of the total susceptibility χ_T and the specific heat C_v , present two peaks at T_c and T_{com} , with ($T_c > T_{com}$). Finally, we examined the influence of thermal variation on the internal energy of the system in Fig. 3(e), we can observe that the internal energy curve rises in the vicinity of the critical temperature of the system T_c . Moreover, there is a fluctuation which in turn represents

the T_{com} . Therefore, if we increase the longitudinal crystal field D , the internal energy will decrease.

In Fig. 4(a–d) we given the influence of the thermal variation on the thermodynamic properties with fixed values $R = -0.3$, $R_1 = 0.1$, $D = 0$, and $h = 0$. Fig. 4(a), show that the two magnetizations curves exhibit the second-order phase transition. such that the critical temperature $T_c = 4.9$. Fig. 4(b), display the total susceptibilities χ_T and the total ferrimagnetic magnetization M_T , we noticed that the two curves present two temperatures, the T_{com} and T_c . We can also see that the shape of total magnetization shifts to N-type behavior. Therefore, in Fig. 4(c), the specific heat C_v curves present a peak at T_c , and their behavior is as much as of the total magnetization M_T . While the internal energy curve is plotted in Fig. 4(d), we got the same outcomes, where the internal energy increased with the increase of temperature sharply near the critical temperature as well.

Fig. 5(a–e), give the effect of exchange interaction R on the magnetic and thermodynamic properties of the system, for selected values of R ($R = -0.3, -0.7, -1, -2$) when fixing $R_1 = 0.1$, $D = -0.5$, and $h = 0.5$. In Fig. 5(a–b), we considered the effect of the exchange interaction on the total and the two sublattice magnetizations (M_T , M_S , and M_σ). We can see that for ($R > -2$) the total magnetization presents triple successive zeros, corresponding respectively to first and second compensation temperatures, in addition to the critical temperature. The intersection point between the sublattice M_S and M_σ magnetizations curves can be found, corresponding to the T_{com} . While this temperature vanished if R decreases. These results are in agreement with those obtained in [66,69]. Also, it is remarked that the total magnetization M_T exhibits standard shape S-type behavior. Furthermore, the curves of total susceptibility and specific heat that were respectively plotted in Fig. 5(c–d) show two peaks at critical and compensation temperatures when increasing exchange interaction R . In Fig. 5(e), as mentioned

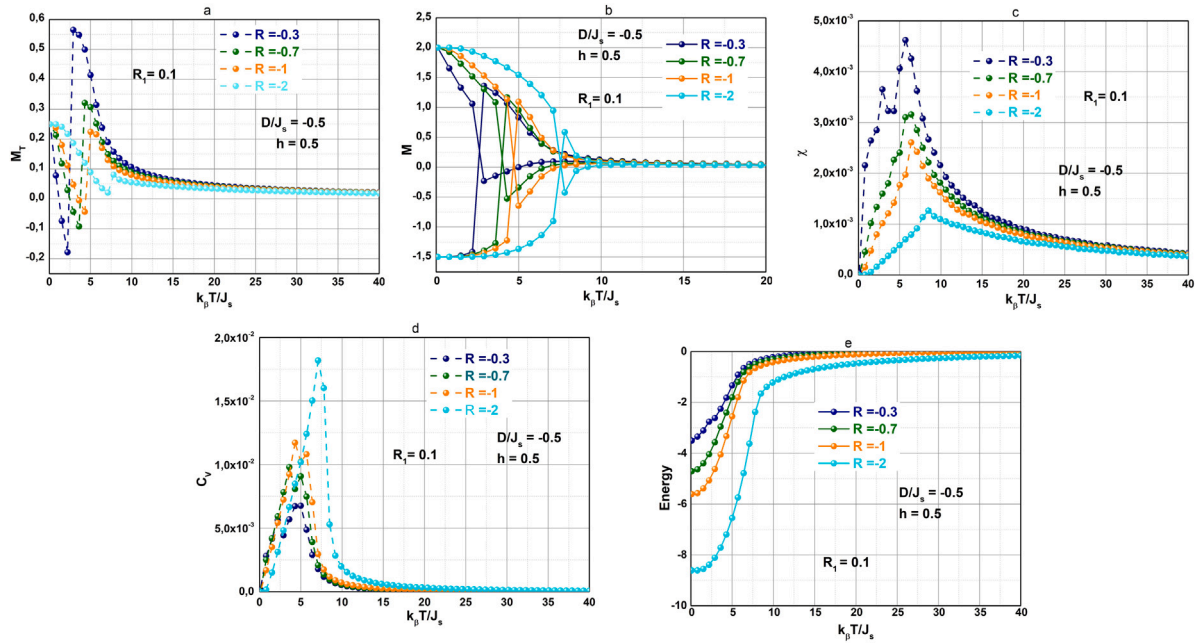


Fig. 5. (Color online) The influence of temperature on the total magnetization M_T , (a), the sublattice S -layer and σ -layer magnetizations (M_σ and M_S) (b), the total magnetic susceptibility χ (c), the specific heat (d) and the free internal energy (e) of a hexagonal Ising ferrimagnetic nanowire with alternate layers for selected values of ($R = -0.3, -0.7, -1, -2$), with fixed values $R_1 = 0.1$, $D = -0.5$, and $h = 0.5$.

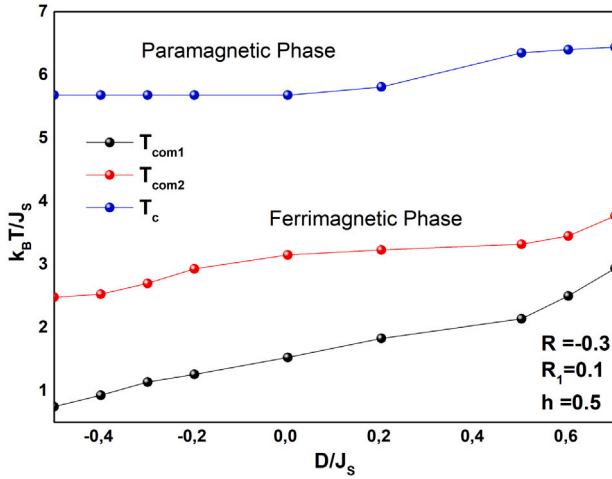


Fig. 6. (Color online) The phase diagram in the $(T, D/J_s)$ plane for fixed values $R = -0.3$, $h = 0.5$, and $R_1 = 0.1$.

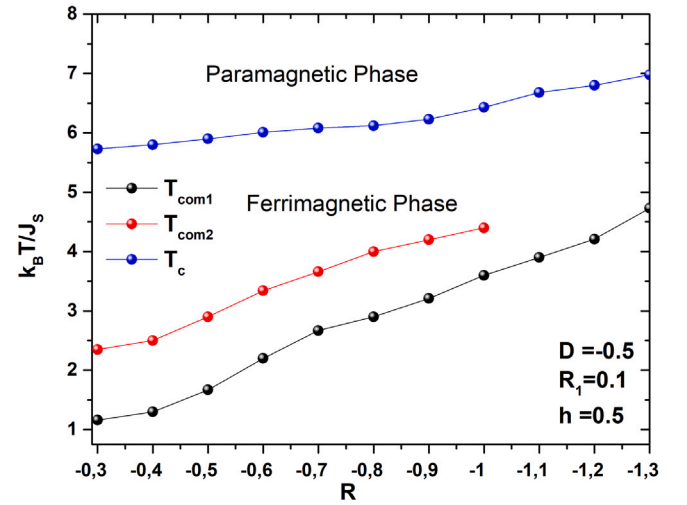


Fig. 7. (Color online) The phase diagram in the (T, R) plane for fixed values $D = -0.5$, $h = 0.5$, and $R_1 = 0.1$.

above, the effect of temperature on internal energy has been examined. We can observe that the more the exchange interaction R decreases, the more the internal energy also decreases.

In Fig. 6, we have plotted the phase diagrams in the $(T, D/J_s)$ plane for selected values $R = -0.3$, $h = 0.5$, and $R_1 = 0.1$. We observe that the total thermal magnetization exhibit the second-order phase transitions. Thus, the critical temperature T_c (curie temperature) remains stable for the negative values of D and rises exponentially with increasing of the longitudinal crystal field to $0 \leq D$. Moreover, the system exhibit double compensation temperature for different positive and negative values of D . We can notice that the tow compensation temperature T_{com1} and T_{com2} increases with the increase of D , and then rises gradually.

In Fig. 7, we have examined the phase diagrams in the (T, R) plane for selected values $D = -0.5$, $h = 0.5$, and $R_1 = 0.1$. The result shows that the total thermal magnetization exhibit the second-order phase transitions. Thus, the critical temperature T_c (curie temperature)

rises slowly with decreasing of the exchange interaction R . Moreover, two compensation temperatures are found. We can show that the tow compensation temperature T_{com} gradually increasing with decreasing of R .

In this latter part, we have investigated the effects of the temperature T/J_s and the longitudinal crystal field D on the hysteresis loops behavior (hysteresis area, coercivity, and remanent) of the system. In Fig. 8(a–f), we studied the effects the temperature T/J_s on the magnetization total. For fixed values of $D = -1$, $R = -1$, and $R_1 = 0.1$, and with several values of temperatures ($T/J_s = 1, 2, 3, 5, 6, 7$), we can remark that the magnetization curves are symmetrical for both positive and negative external magnetic fields $h = \pm 8$. Moreover, the curves show the triple hysteresis loops at low temperature ($T \leq 2$). This behavior disappears when increasing the values of temperature ($T > 2$). this phenomenon of three hysteresis loops has been obtained

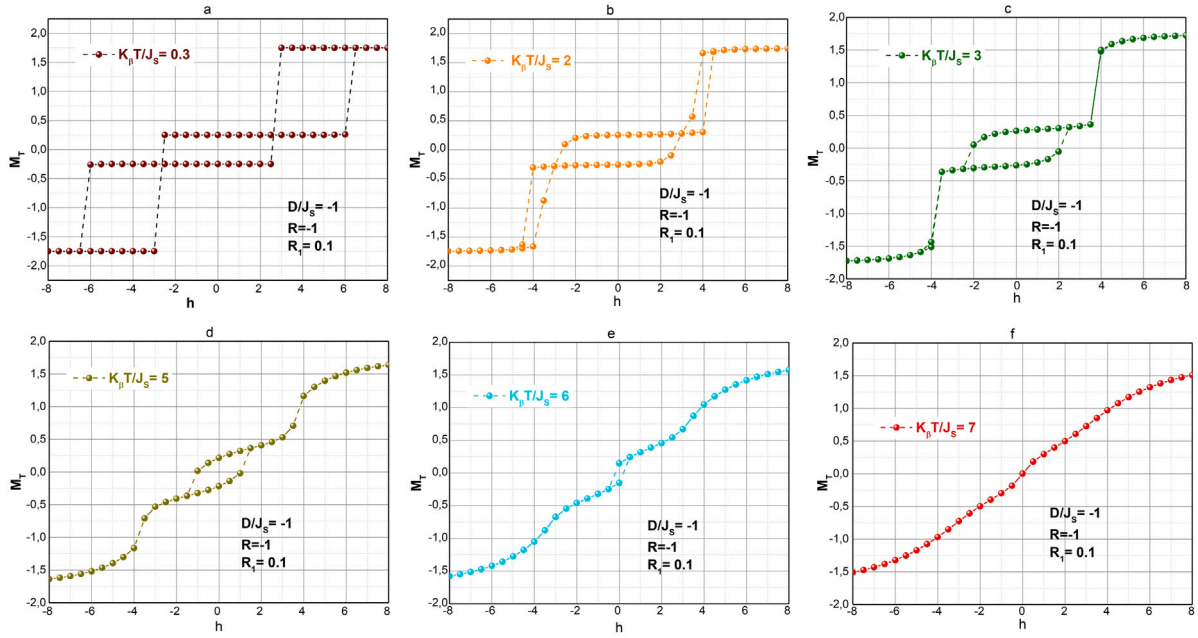


Fig. 8. (Color online) Hysteresis loops (The external longitudinal field h as a function of the total longitudinal magnetization M_T) for selected values of (a) $\frac{T}{J_s} = 0.3$, (b) $\frac{T}{J_s} = 2$, (c) $\frac{T}{J_s} = 3$, (d) $\frac{T}{J_s} = 5$, (e) $\frac{T}{J_s} = 6$, (f) $\frac{T}{J_s} = 7$, and for fixed values of $D = -1$, $R = -1$, and $R_1 = 0.1$.

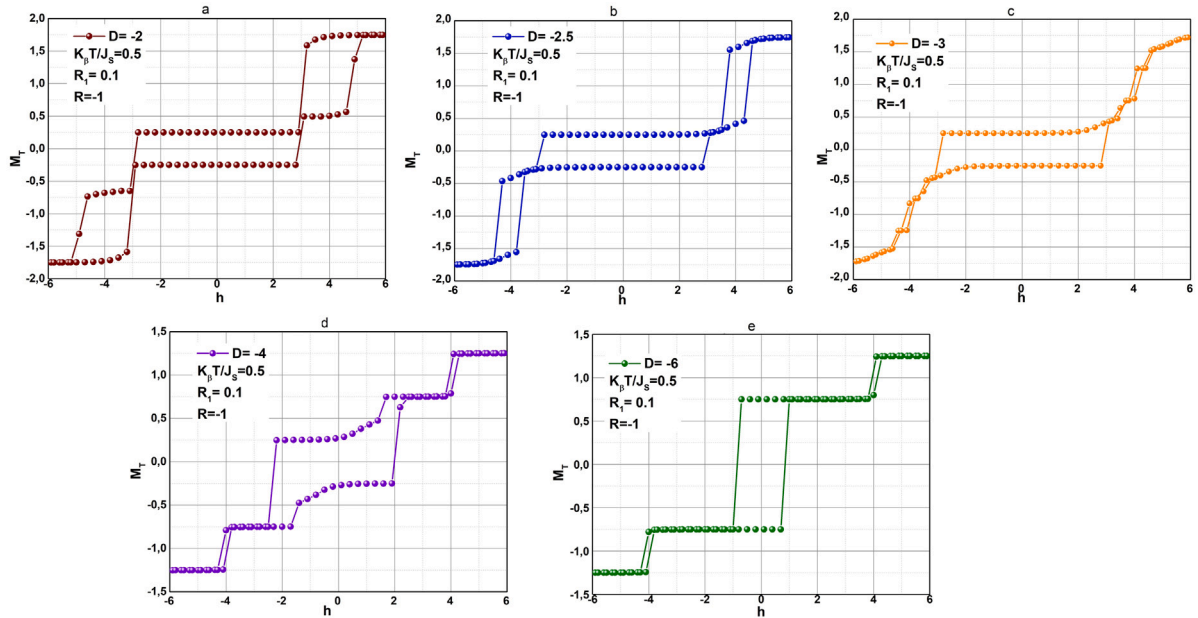


Fig. 9. (Color online) Hysteresis loops (The external longitudinal field h as a function of the total longitudinal magnetization M_T) for selected values of (a) $D = -2$, (b) $D = -2.5$, (c) $D = -3$, (d) $D = -4$, (e) $D = -6$ and for fixed values of $R = -0.3$, $R_1 = 0.1$ at low-temperature $T/J_s = 0.5$.

theoretically in Blume–Capel nanowire [70], in ladder-type graphene nanoribbon [71] and experimentally in CoFeB/Cu, CoNiP/Cu, FeGa/py, and FeGa/CoFeB multilayered nanowires [72]. We note that this triple hysteresis loops phenomenon has potential applications in multi-state memory devices [73].

Fig. 9(a–e) shows the longitudinal crystal field D effect on the hysteresis loops for selected negative values ($D = -2, -2.5, -3, -4, -6$), with fixed parameters $R = -0.3$, $R_1 = 0.1$ and $T/J_s = 0.5$. As shown in Fig. 9(c) seven hysteresis loops are found for $D = -3$. The total magnetization curves have symmetric behaviors both the positive and negative external magnetic field $h = \pm 6$. If we changed values of D to ($D = -2.5, D = -2, D = -4, D = -6$) the hysteresis behaviors

vanished and the number of loops decreased to triple hysteresis In Fig. 9(a,b,d,e) [66,74,75].

4. Conclusion

We have applied the Monte Carlo method based of the Metropolis algorithm to study the effect of longitudinal crystal field and exchange interaction constants on the thermodynamic and magnetic properties, as well as on the phase diagram behaviors within $(T, D/J_s)$ plans of a hexagonal ferrimagnetic mixed spin-3/2 and 2 Ising nanowire with alternate layers. We found that the system undergoes a second-order phases transitions and can be exhibit one and two compensation

temperature points depending of physics parameters. The longitudinal crystal field and temperature effects on the hysteresis loops of the system have been also examined. We Noted that seven hysteresis loops have been obtained for selected negative values of the longitudinal crystal field D . Moreover, the number of loops decreases to stabilize in triple loops for other negative values of D . This multi-loop hysteresis disappears with the increase of temperature. Our results are consistent with the theoretical studies [69,70,73,75] and the experimental results [72].

CRedit authorship contribution statement

B. Nmaila: Conceptualization, Methodology, Software, Data curation, Writing- original draft, Reviewing and editing. **K. Htoutou:** Conceptualization, Methodology, Data curation, Investigation, Supervision, Validation. **L.B. Drissi:** Supervision, Validation. **R. Ahl Laamara:** Supervision, Validation.

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge financial support from Hassan II Academy of Science and Technology, Rabat, Morocco.

References

- [1] K. Kim, T.M. Wallis, P. Rice, C.J. Chiang, A. Imtiaz, P. Kabos, D.S. Filipovic, A framework for broadband characterization of individual nanowires, *IEEE Microw. Wirel. Compon. Lett.* 20 (3) (2010) 178–180.
- [2] G. Goglio, S. Pignard, A. Radulescu, L. Piraux, I. Huynen, D. Vanhoenacker, A.V. Vorst, Microwave properties of metallic nanowires, *Appl. Phys. Lett.* 75 (12) (1999) 1769–1771.
- [3] A.M. Morales, C.M. Lieber, A laser ablation method for the synthesis of crystalline semiconductor nanowires, *Science* 279 (5348) (1998) 208–211.
- [4] C.B. Maliakkal, D. Jacobsson, M. Tornberg, A.R. Persson, J. Johansson, R. Wallenberg, K.A. Dick, In situ analysis of catalyst composition during gold catalyzed gas nanowire growth, *Nature Commun.* 10 (1) (2019) 1–9.
- [5] D. Wang, Q. Wang, A. Javey, R. Tu, H. Dai, H. Kim, P.C. McIntyre, T. Krishnamohan, K.C. Saraswat, Germanium nanowire field-effect transistors with SiO₂ and high- κ HfO₂ gate dielectrics, *Appl. Phys. Lett.* 83 (12) (2003) 2432–2434.
- [6] P.R. Wiecha, A. Cuche, H. Kallel, C. Girard, G.C. des Francs, A. Lecestre, G. Larrieu, F. Fournel, V. Larrey, T. Baron, V. Paillard, A. Arbouet, Fano-resonances in high index dielectric nanowires for directional scattering, in: *Fano Resonances in Optics and Microwaves*, Springer, Cham, 2019, pp. 283–309.
- [7] W. Chen, G. Guler, E. Kuruvilla, G.B. Schuster, H.C. Chiu, E. Riedo, Development of self-organizing, self-directing molecular nanowires: synthesis and characterization of conjoined dna-bis (2-thienyl) pyrrole oligomers, *Macromolecules* 43 (9) (2010) 4032–4040.
- [8] S. Wang, J.L. Zuo, S. Gao, Y. Song, H.C. Zhou, Y.Z. Zhang, X.Z. You, The observation of superparamagnetic behavior in molecular nanowires, *J. Am. Chem. Soc.* 126 (29) (2004) 8900–8901.
- [9] D. Mihailovic, Inorganic molecular wires: Physical and functional properties of transition metal chalcogenide polymers, *Prog. Mater. Sci.* 54 (3) (2009) 309–350.
- [10] C.N.R. Rao, F.L. Deepak, G. Gundiah, A. Govindaraj, Inorganic nanowires, *Prog. Solid State Chem.* 31 (1–2) (2003) 5–147.
- [11] F. Patolsky, G. Zheng, C.M. Lieber, Nanowire-based biosensors, *0* (2006) 4260–4269.
- [12] S. Roth, G. Bugnicourt, M. Bisbal, S.G. Faure, J. Brocard, C. Villard, Neuronal architectures with axo-dendritic polarity above silicon nanowires, *Small* 5 (5) (2012) 671–675.
- [13] F. Bellei, A.P. Cartwright, A.N. McCaughan, A.E. Dane, F. Najafi, Q. Zhao, K.K. Berggren, Free-space-coupled superconducting nanowire single-photon detectors for infrared optical communications, *Opt. Express* 24 (4) (2016) 3248–3257.
- [14] S.H. Lee, D.K. Ko, Y. Jung, R. Agarwal, Size-dependent phase transition memory switching behavior and low writing currents in GeTe nanowires, *Appl. Phys. Lett.* 89 (22) (2006) 223116.
- [15] C. Toro, J.M. Buriak, Wired chemistry: The synthetic chemistry that made silver nanowire-based electrodes possible: Chemistry of materials' club, *Chem. Mater.* 30 (2018) 4875.
- [16] L. Mai, X. Tian, X. Xu, L. Chang, L. Xu, Nanowire electrodes for electrochemical energy storage devices, *Chem. Rev.* 114 (23) (2014) 11828–11862.
- [17] C. Young, J. Wang, J. Kim, Y. Sugahara, J. Henzie, Y. Yamauchi, Controlled chemical vapor deposition for synthesis of nanowire arrays of metal-organic frameworks and their thermal conversion to carbon/metal oxide hybrid materials, *Chem. Mater.* 30 (10) (2018) 3379–3386.
- [18] N.I. Goktas, P. Wilson, A. Ghukasyan, D. Wagner, S. McNamee, R.R. LaPierre, Nanowires for energy: A review, *Appl. Phys. Rev.* 5 (4) (2018) 041305.
- [19] C.K. Chan, H. Peng, G. Liu, K. McIlwrath, X.F. Zhang, R.A. Huggins, Y. Cui, High-performance lithium battery anodes using silicon nanowires, *Nature Nanotechnol.* 3 (1) (2008) 31–35.
- [20] W. Yan, T. Ayyvazian, J. Kim, Y. Liu, K.C. Donavan, W. Xing, Y. Yang, J.C. Hemminger, R.M. Penner, Mesoporous manganese oxide nanowires for high-capacity, high-rate, hybrid electrical energy storage, *ACS Nano* 5 (10) (2011) 8275–8287.
- [21] H. Cao, Y. Xie, Q. Feng, H. Wang, X. Wang, Z. Xu, F. Xiao, W. Zhou, K. Pan, Multifunctional catalysts with high catalytic activities: flower-like Co9S8 microballs assembled with weak crystalline pea pod-shaped nanowires, *Int. J. Hydrogen Energy* 43 (41) (2018) 18832–18842.
- [22] K. Nielsch, R.B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, S.F. Fischer, H. Kronmüller, T. Schweinböck, D. Weiss, U. Gosele, High density hexagonal nickel nanowire array, *J. Magn. Magn. Mater.* 249 (1–2) (2002) 234–240.
- [23] M.A. Doucey, S. Carrara, Nanowire sensors in cancer, *Trends Biotechnol.* 37 (1) (2019) 86–99.
- [24] L. Tsakalakos, J. Balch, J. Fronheiser, B.A. Korevaar, O. Sulima, J. Rand, Silicon nanowire solar cells, *Appl. Phys. Lett.* 91 (23) (2007) 233117.
- [25] B. Yu, X.H. Sun, G.A. Calebotta, G.R. Dholakia, M. Meyyappan, One-dimensional germanium nanowires for future electronics, *J. Cluster Sci.* 17 (4) (2006) 579–597.
- [26] M. Kim, J. Kim, Y. Hou, D. Yu, Y.J. Doh, B. Kim, K.W. Kim, J. Suh, Nanomechanical characterization of quantum interference in a topological insulator nanowire, *Nature Commun.* 10 (1) (2019) 1–7.
- [27] A. Pateras, R. Harder, S. Manna, B. Kiefer, R.L. Sandberg, S. Trugman, J.W. Kim, J. de la Venta, E.E. Fullerton, O.G. Shpyrko, E. Fohntung, Room temperature giant magnetostriction in single-crystal nickel nanowires, *NPG Asia Mater.* 11 (1) (2019) 1–7.
- [28] H.W. Wu, C.J. Tsai, L.J. Chen, Room temperature ferromagnetism in Mn+-implanted Si nanowires, *Appl. Phys. Lett.* 90 (4) (2007) 043121.
- [29] F.D. Guerra, M.F. Attia, D.C. Whitehead, F. Alexis, Nanotechnology for environmental remediation: materials and applications, *Molecules* 23 (7) (2018) 1760.
- [30] K. Nagashima, T. Yanagida, K. Oka, M. Taniguchi, T. Kawai, J.S. Kim, B.H. Park, Resistive switching multistate nonvolatile memory effects in a single cobalt oxide nanowire, *Nano Lett.* 10 (4) (2010) 1359–1363.
- [31] Y. Nakayama, P.J. Pauzauskie, A. Radenovic, R.M. Onorato, R.J. Saykally, J. Liphardt, P. Yang, Tunable nanowire nonlinear optical probe, *Nature* 447 (7148) (2007) 1098–1101.
- [32] T.S. Pui, A. Agarwal, F. Ye, N. Balasubramanian, P. Chen, CMOS-compatible nanowire sensor arrays for detection of cellular bioelectricity, *Small* 5 (2) (2009) 208–212.
- [33] T. Maurer, F. Ott, G. Chaboussant, Y. Soumare, J.Y. Piquemal, G. Viau, Magnetic nanowires as permanent magnet materials, *Appl. Phys. Lett.* 91 (17) (2007) 172501.
- [34] O.V. Skryabina, S.N. Kozlov, S.V. Egorov, A.A. Klimenko, V.V. Ryazanov, S.V. Bakurskiy, M.Y. Kupriyanov, N.V. Klenov, I.I. Soloviev, A.A. Golubov, K.S. Napolskii, I.A. Golovchanskiy, D. Roditchev, V.S. Stolyarov, Anomalous magneto-resistance of Ni-nanowire/Nb hybrid system, *Sci. Rep.* 9 (1) (2019) 1–7.
- [35] Z.D. Vatansever, Hysteresis properties of a quenched disordered binary alloy cylindrical nanowire: A Monte Carlo simulation study, *J. Alloys Compd.* 720 (2017) 388–394.
- [36] Y. Kocakaplan, E. Kantar, Thermodynamic and magnetic properties of the hexagonal type Ising nanowire, *Eur. Phys. J. B* 87 (6) (2014) 135.
- [37] W. Jiang, J.Q. Huang, Magnetic properties of a hexagonal prismatic nanoparticle with ferrimagnetic core-shell structure, *Physica E* 78 (2016) 115–122.
- [38] M. Yang, W. Wang, B.C. Li, H.J. Wu, S.Q. Yang, J. Yang, Magnetic properties of an Ising ladder-like graphene nanoribbon by using Monte Carlo method, *Physica A* 539 (2020) 122932.
- [39] B.Z. Mi, C.J. Feng, J.G. Luo, D.Z. Hu, Magnetic compensation and critical properties of a mixed spin-(2, 3/2) Heisenberg single-walled nanotube superlattice, *Superlattices Microstruct.* 113 (2018) 524–533.
- [40] N. De La Espinellaa, G.M. Buendia, Ground state phase diagrams for the mixed Ising 3/2 and 5/2 spin model, *Physica A* 389 (14) (2010) 2725–2732.
- [41] N. De La Espinellaa, C.O. Lopez, F.T. Hoyos, Critical and compensation temperatures for the mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising model, *Rev. Mexicana Fis.* 59 (2) (2013) 95–101.
- [42] A. Patsopoulos, D. Kechrakos, Exchange bias effect in cylindrical nanowires with ferromagnetic core and polycrystalline antiferromagnetic shell, *J. Magn. Magn. Mater.* 465 (2018) 678–684.
- [43] W. Wang, D. Lv, F. Zhang, J. I. Bi, J.N. Chen, Monte Carlo simulation of magnetic properties of a mixed spin-2 and spin-5/2 ferrimagnetic Ising system in a longitudinal magnetic field, *J. Magn. Magn. Mater.* 385 (2015) 16–26.
- [44] R.M. Francisco, J.P. Santos, Magnetic properties of the Ashkin-Teller model on a hexagonal nanotube, *Phys. Lett. A* 383 (11) (2019) 1092–1098.
- [45] Z. Jie, X.X. Guang, W.G. Zhu, Phase diagram of transverse spin-2 Ising model with longitudinal crystal field, *Commun. Theor. Phys.* 52 (1) (2009) 163.

- [46] K. Htoutou, Y. Benhouria, A. Oubelkacem, R.A. Laamara, L.B. Drissi, Random crystal field effect on hysteresis loops and compensation behavior of mixed spin-(1, 3/2) Ising system, *Chin. Phys. B* 26 (12) (2017) 127501.
- [47] Y. Kocakaplan, E. Kantar, M. Keskin, Hysteresis loops and compensation behavior of cylindrical transverse spin-1 Ising nanowire with the crystal field within effective-field theory based on a probability distribution technique, *Eur. Phys. J. B* 86 (10) (2013) 420.
- [48] M. Ertas, Y. Kocakaplan, Dynamic behaviors of the hexagonal Ising nanowire, *Phys. Lett. A* 378 (10) (2014) 845–850.
- [49] H.K. Mohamad, H.F. Alturki, Spin compensation temperatures of a mixed spin Blume–Capel Ising ferrimagnetic system: a study of low-temperature molecular magnet, *J. Supercond. Nov. Magn.* 32 (12) (2019) 3971–3978.
- [50] M. Ertas, A. Yilmaz, Dynamic magnetic properties of mixed half-integer ($\sigma = 3/2$) and half-integer ($S = 5/2$) spins: Dynamic effective-field theory, *Comput. Condens. Matter* 14 (2018) 1–7.
- [51] K. Yao, J. Li, Z. Liu, H. Fu, L. Zu, Magnetic properties of a mixed spin-2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system on a two-dimensional honeycomb lattice: Green's function approach, *Commun. Theor. Phys.* 47 (4) (2007) 741.
- [52] J.L. Bi, W. Wang, Q. Li, Monte Carlo Study of a ferrimagnetic mixed-spin (2, 5/2) system with the nearest and next-nearest neighbors exchange couplings, *Superlattices Microstruct.* 107 (2017) 104–117.
- [53] L. Wei-Jie, X. Zi-Hua, C. Si-Lun, Z. Cong-Yan, Effective-field and Monte Carlo studies of mixed spin-2 and spin-1/2 Ising diamond chain, *Chin. Phys. B* 22 (2) (2013) 027501.
- [54] T. Kaneyoshi, The effects of an applied transverse field in a graphene-like Ising bilayer film with nonequivalent planes, *J. Supercond. Nov. Magn.* 32 (5) (2019) 1271–1277.
- [55] M. Ertas, E. Kantar, Hexagonal type Ising nanowire with spin-1 core and spin-2 shell structure, *Commun. Theor. Phys.* 64 (4) (2015) 401.
- [56] J.M. Liu, H.L. Chan, C.L. Choy, C.K. Ong, Scaling of hysteresis dispersion in a model spin system, *Phys. Rev. B* 65 (1) (2001) 014416.
- [57] B.K. Chakrabarti, M. Acharyya, Dynamic transitions and hysteresis, *Rev. Modern Phys.* 71 (3) (1999) 847.
- [58] D. Lv, F. Wang, R.J. Liu, Q. Xue, S.X. Li, Monte Carlo Study of magnetic and thermodynamic properties of a ferrimagnetic mixed-spin (1, 3/2) Ising nanowire with hexagonal core-shell structure, *J. Alloys Compd.* 701 (2017) 935–949.
- [59] Z.D. Vatansever, Monte Carlo Simulation study for hysteresis properties of a prussian blue analog nanowire, *Physica B* 545 (2018) 397–401.
- [60] E. Kantar, The effects of the composition, temperature and geometry on the hysteretic properties of the Ising-type barcode nanowire, *Eur. Phys. J. B* 89 (12) (2016) 281.
- [61] M. Ertas, Hysteresis and compensation behaviors of mixed spin-1 and spin-2 hexagonal Ising nanowire system, *J. Supercond. Nov. Magn.* 29 (7) (2016) 1805–1812.
- [62] W. Jiang, X.X. Li, L.M. Liu, J.N. Chen, F. Zhang, Hysteresis loop of a cubic nanowire in the presence of the crystal field and the transverse field, *J. Magn. Mater.* 353 (2014) 90–98.
- [63] U. Akinci, Crystal field dilution in S-1 Blume Capel model: Hysteresis behaviors, *Phys. Lett. A* 380 (14–15) (2016) 1352–1357.
- [64] K. Htoutou, B. Nmaila, M. Madani, L.B. Drissi, R.A. Laamara, Monte Carlo Study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1, 1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers, *Mater. Res. Express* 4 (11) (2017) 116108.
- [65] L. Larrimore, Monte Carlo Simulation of the 2D Ising Model. *Physics* 114 - Seminar 14.
- [66] Q. Li, R.D. Li, W. Wang, R.Z. Geng, H. Huang, S.J. Zheng, Magnetic and thermodynamic characteristics of a rectangle Ising nanoribbon, *Physica A* 555 (2020) 124741.
- [67] A. Feraoun, A. Zaim, M. Kerouad, Monte Carlo Study of the phase diagrams of a ferrimagnetic nanowire with alternate layers, *J. Supercond. Nov. Magn.* 29 (4) (2016) 971–980.
- [68] N. Zaim, A. Zaim, M. Kerouad, Monte Carlo Study of the random magnetic field effect on the phase diagrams of a spin-1 cylindrical nanowire, *J. Alloys Compd.* 663 (2016) 516–523.
- [69] D. Lv, W. Jiang, Y. Ma, Z. Gao, F. Wang, Magnetic and thermodynamic properties of a cylindrical ferrimagnetic Ising nanowire with core/shell structure, *Physica E* 106 (2019) 101–113.
- [70] H. Magoussi, A. Zaim, M. Kerouad, M. Monte Carlo simulation of the magnetic properties of a spin-1 Blume–Capel nanowire, *Solid State Commun.* 200 (2014) 32–41.
- [71] Z.Y. Gao, D. Lv, W. Wang, J. Yu, Study on the dynamic magnetic behaviors in a ferrimagnetic mixed spin Ising ladder-type graphene nanoribbon, *Polymer* 223 (2021) 123678.
- [72] N. Lupu, M. Lostun, H. Chiriac, Surface magnetization processes in soft magnetic nanowires, *J. Appl. Phys.* 107 (9) (2010) 09E315.
- [73] S. Bouhou, I. Essaoudi, A. Ainane, M. Saber, F. Dujardin, J.J. de Miguel, Hysteresis loops and susceptibility of a transverse Ising nanowire, *J. Magn. Mater.* 324 (16) (2012) 2434–2441.
- [74] W. Wang, L. Sun, R.D. Li, Z.Y. Gao, F. Wang, M. Tian, Dynamic magnetic behaviors of a double-layer core/shell graphene nanoribbon in a time-dependent magnetic field, *Results Phys.* 19 (2020) 103573.
- [75] L. Sun, W. Wang, D. Lv, Z.Y. Gao, Q. Li, B.C. Li, Magnetic and thermodynamic behaviors of the graphene-like quantum dots: A Monte Carlo study, *J. Magn. Mater.* 528 (2021) 167820.

Thermodynamic and magnetic properties of a mixed spins (3/2, 5/2) Ising nanowire with hexagonal structure: Monte Carlo simulation

B Nmaila^{1*} , K Htoutou^{1,3*}, R Ahlaamara^{1,2,3} and L B Drissi^{1,2,4}

¹LPHE-MS, Laboratory of High Energy Physics-Modeling & Simulations, Department of Physics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Rabat, Morocco

²CPM, Center of Physics and Mathematics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Rabat, Morocco

³Department of Physics, CRMEF, Regional Center for Education and Training Profession, Fes-Meknes, Morocco

⁴Hassan II Academy of Sciences and Technology, Rabat, Morocco

Received: 14 April 2021 / Accepted: 12 May 2022

Abstract: In this work, the thermodynamic and magnetic properties such as total and partial magnetizations, magnetic susceptibility, internal energy, total specific heat, magnetic hysteresis loops and compensation temperature of a ferromagnetic mixed spins-3/2 and spins-5/2 hexagonal Ising nanowire, have been determined by using Monte Carlo method based on the Metropolis algorithm. The effects of the longitudinal crystal field, the exchange interactions and the temperature on the magnetic properties and hysteresis loops are examined in detail for different values of the system parameters. Moreover, different interesting magnetic phenomena were obtained, such as the seven and triple hysteresis loops at low temperatures, the tricritical point and compensation behavior under certain physical parameters were detected. Our results are also compared with some experimental and theoretical results.

Keywords: Nanowire; Ising model; Alternate layers; Magnetic properties; Hysteresis loops; Compensation temperature; Monte Carlo simulation; Metropolis algorithm; Longitudinal crystal field; Tricritical point

1. Introduction

Recently, nanomaterials such as nanowires, nanoparticles, nanofibers, nanodots, nanofilms, nanorods, nanobelts and nanotubes have attracted considerable attention to theoretical and experimental researches. They have a large fraction of surface atoms per unit volume. This considerable increase in the ratio of surface atoms to the volume atoms in nanomaterials is responsible for significant changes in the physical and other properties of the materials [1]. Nowadays, these components have been used in many fields, such as electrical energy storage [2–4], storage with a high density [5, 6], superparamagnetism at room temperature [7, 8] and mechanical stability [9, 10], Ultra-high-density magnetic recording media [11–13], environmental remediation [14, 15], multi-state memory devices [16, 17], nonlinear optics [18, 19], bioelectronics [20],

permanent magnets [21] and vacuum electron emitters [22]. The frequently used magnetic nanowires are *NdFeB* [23, 24], ferrite [25, 26], *Sm – Co*, *Fe – Co*, and *SmCo*, *Fe – Co – Dy* [27], *Fe – Co* and *Sm³⁺* [28].

The magnetic properties of ferrimagnetic Ising systems have already been surveyed with mixed spin models (2, 5/2) [29, 30], (1, 3/2) [31–33], (1/2, 5/2) [34, 35], (1/2, 3/2) [36, 37], (3/2, 2) [38, 39]. Also, mixed spin systems, such as (3/2, 5/2), reveal a richness in magnetic and thermodynamic properties, the thing which has prompted many researchers to more investigate these interesting systems. J. D. Alzate-Cardona et al studied the effect of exchange interactions and longitudinal anisotropy on the critical and compensation temperature of core-shell nanowire using the Monte Carlo method [40]. With the same method, N. De La Espriella et al examined the effect of longitudinal magnetic field on the magnetic properties and the phase diagrams with transition temperature for a square lattice structure [41]. Also, Y. Yang et al investigated the effects of longitudinal anisotropy of magnetic and thermodynamic properties such as the phase diagrams and hysteresis loops

*Corresponding author, E-mail: nmaila.badreddine@gmail.com; khadija.htoutou2021@gmail.com

of a nanoisland on a quadrangle lattice [42]. By means of mean-field theory W. Guo-Zhu et al investigated the phase diagram with single-ion anisotropy effect of the mixed spin (3/2, 5/2) Ising ferromagnetic model [43]. E. Albayrak is using the mixed spin Blume-Capel Ising ferrimagnetic system on the Bethe lattice to study the phase diagrams [44], and there are other studies involving this type of mixed spin [45–50]. Among the important results, they showed that the compensation behavior, the second-order phase transition, the first-order–disorder phase transition and the tricritical point have been detected. The single, double and triple hysteresis loop has been found under physical parameters.

On the other hand, dynamic properties of mixed spin (3/2, 5/2) have taken an important place in condensed physics. M. Keskin et al examined the dynamic magnetic properties such as the dynamic phase diagrams of the Ising bilayer system by using the dynamic mean-field theory based on the Glauber-type stochastic [51]. Using the same method, M. Ertaş et al examined the influence of temperature, crystal field and frequency on the dynamic magnetic hysteresis behaviors on square lattice [52]. The dynamic phase diagrams and the different compensations behavior have been studied by B. Deviren within a mean-field approach [53]. There are other works that are interested in this type of dynamic magnetic properties [54–58]. Among the different results obtained for these studies, the systems exhibit the first- and second-order phase transition, the dynamic compensation and tricritical points, and the single, double and triple hysteresis loop has been detected under physical parameters. Finally, we mention that the mixed spin model (3/2, 5/2) is suitable for the understanding of some biological compounds. Moreover, R. Weiss et al presented work that studied model complexes of mixed spin (3/2, 5/2) states [59]. Then, they cited various results of studies on the unusual magnetic properties of certain types of ferric heme proteins and model ferric heme porphyrin complexes with five and six coordinates in which the ferric centers characterized in quantum mechanics with different degrees of average spin contribution.

The recent study of the hexagonal mixed spin-(1/2, 1) Ising ferrimagnetic nanowire with alternate layers was examined using the Monte Carlo method based on the Metropolis algorithm [60], and we will show that the system does not exhibit compensation behavior and triple hysteresis loops have been found. Then we changed the mixed spin type to (3/2, 2) [61]. Among the important results, we found two compensation points, the system exhibits a second-order phase transition, and also seven hysteresis loop was detected in certain physical parameters. On the basis of the previous studies, which we carried out, or the studies that interested on the mixed systems (3/2, 5/2), we observed that there are different magnetic and

thermodynamic results either in equilibrium and out of equilibrium (dynamic). Our objective is to give and add other important results and compare them with the works already done, for example the first- and second-order transitions, the compensation behavior, the critical points and multi-hysteresis loop phenomena. For that, this paper directed our interest toward the longitudinal crystal field and the exchange interactions influences on magnetic properties, such as total magnetization, susceptibility, specific heat and internal energy. Moreover, the magnetic hysteresis loops behavior has been investigated under the effects of the longitudinal crystal field, the exchange interactions and the temperature with the fixed and selective values of physical parameters. The results obtained show that the nanowire with mixed spin (3/2, 5/2) has various important magnetic behaviors which have been utilized in several magnetic applications. These behaviors were discussed and tried in the following sections and were compared to other results taken from other studies [53, 54]. In the following section, we will describe the model and give the Monte Carlo technique a form. As for the third section, we will elaborate on the results and discussions. In the fourth section, we will conclude our paper.

2. Model and formalism

We considered a hexagonal Ising nanowire composed with alternate spin-3/2 ferromagnetic σ layers and spin-5/2 ferromagnetic S -layers, submitted to a longitudinal crystal and external magnetic fields. The Hamiltonian of the system is given by :

$$\begin{aligned}
 H = & -J_S \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} - J_\sigma \sum_{\langle nm \rangle} \sigma_{nz} \sigma_{mz} - J_{\text{int}} \sum_{\langle in \rangle} S_{iz} \sigma_{nz} \\
 & - D \left(\sum_i (S_{iz})^2 + \sum_n (\sigma_{nz})^2 \right) \\
 & - h \left(\sum_i S_{iz} + \sum_n \sigma_{nz} \right)
 \end{aligned} \tag{1}$$

where $S_i = \pm(3/2)$ and $\sigma_k = \pm(5/2)$ denote the z component at site i and n , respectively. The couplings $J_{(S)}$, $J_{(\sigma)}$ and $J_{(\text{int})}$ are the exchange interaction parameters between two nearest-neighbor pairs of spins S - S , σ - σ and S - σ , respectively. D and h are the longitudinal crystal and the external fields, respectively. The three first summation expresses the summation over all pairs of neighboring spins at S -layer, σ -layer and the interface, respectively. Using the Monte Carlo simulation based on Metropolis algorithm, we apply periodic boundary conditions in the z -direction which is of finite thickness L . Free boundary conditions are applied in the x - and y -directions. The simulations are

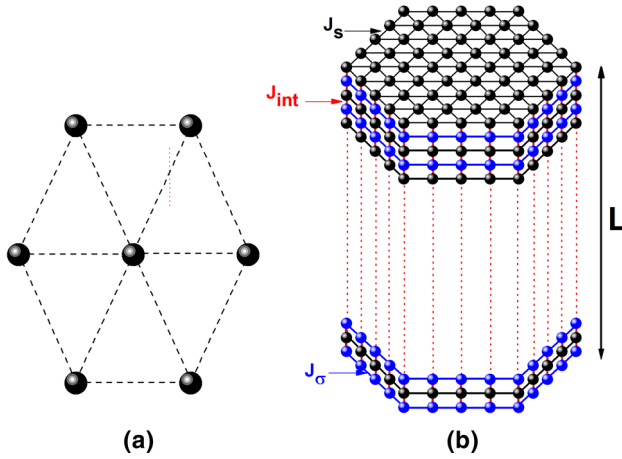


Fig. 1 Schematic representation of a hexagonal Ising nanowire with alternate layers; S -layers of spin-5/2 and σ -layers of spin-3/2: (a) cross section and (b) three-dimensional. The black circles present magnetic atoms (spin- $S = 5/2$), and the blue circles delegate magnetic atoms (spin- $\sigma = 3/2$). J_{int} the exchange coupling between the S -layers and σ -layers is antiferromagnetic ($R = \frac{J_{int}}{J_s} < 0$)

carried out for N.L spins, with N is the spin numbers of the nanowire cross section, of the S -layer (σ -layer) and L denotes the wire length's. The numerical results are obtained for the size system $L = 100$ [62] (Fig. 1).

The two sublattice magnetizations M_s and M_σ are presented by:

$$M_s = \frac{1}{N \cdot \frac{L}{2}} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \quad (2)$$

And

$$M_\sigma = \frac{1}{N \cdot \frac{L}{2}} \left\langle \sum_n \sigma_n \right\rangle \quad (3)$$

The total magnetization is:

$$M_T = \frac{(M_s + M_\sigma)}{2} \quad (4)$$

And the total susceptibility χ is given by:

$$\chi = \beta \cdot N \left(\langle M_T^2 \rangle - \langle M_T \rangle^2 \right) \quad (5)$$

With $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B is the Boltzmann constant taken to be $k_B = 1$, for simplicity. The internal energy $\langle E \rangle$ of the system is:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2 \cdot N \cdot L} \langle H \rangle \quad (6)$$

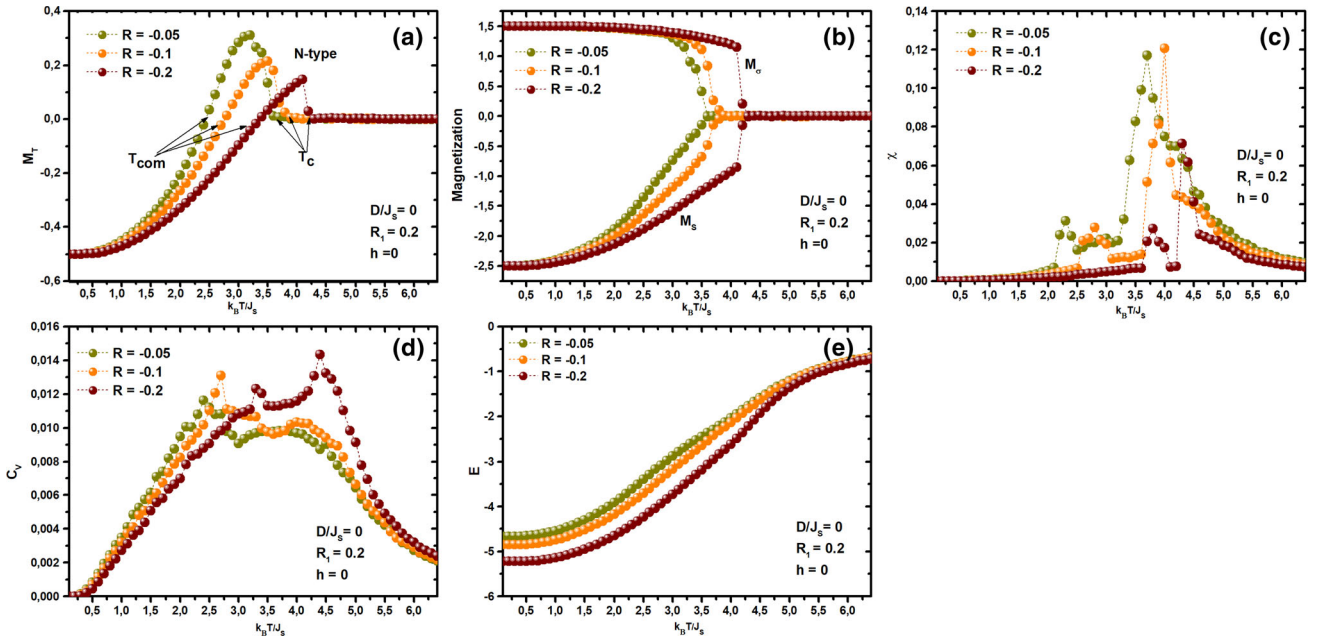


Fig. 2 Temperature dependence of the total magnetization M_T (a), sublattice magnetizations per spin M_σ and M_s (b), total magnetic susceptibility (c), specific heat (d) and total internal energy (e), of a hexagonal Ising ferrimagnetic nanowire with alternate S -layer and σ -

layer for selected negative values of ($R = -0.05, -0.1, -0.2$). The values of R_1 , D/J_s , and h are fixed at $R_1 = 0.2$, $D/J_s = 0.0$, and $h = 0.0$

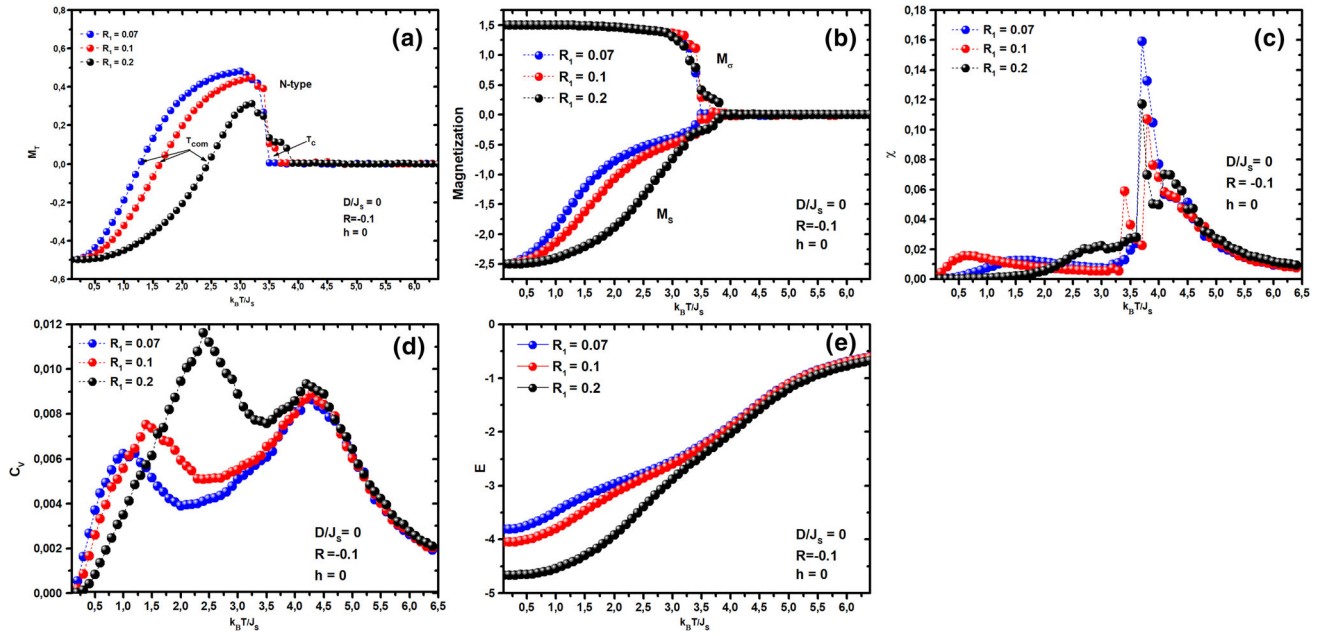


Fig. 3 Temperature dependence of the total longitudinal magnetization M_T (a), sublattice magnetizations per spin M_σ and M_S (b), total magnetic susceptibility (c), specific heat (d) and total internal energy (e), of a hexagonal Ising ferrimagnetic nanowire with alternate S -layer

and σ -layer for selected positive values of ($R_1 = 0.07, 0.1, 0.2$). The values of R , D/J_S , and h are fixed at $R = -0.1$, $D/J_S = 0.0$, and $h = 0.0$

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle = \frac{1}{2NL} \left\langle -J_S \sum_{\langle ij \rangle} S_{iz} S_{jz} - J_\sigma \sum_{\langle nm \rangle} \sigma_{nz} \sigma_{mz} \right. \\
 \left. - J_{\text{int}} \sum_{\langle in \rangle} S_{iz} \sigma_{nz} - D \left(\sum_i (S_{iz})^2 + \sum_n (\sigma_{nz})^2 \right) \right. \\
 \left. - h \left(\sum_i S_{iz} + \sum_n \sigma_{nz} \right) \right\rangle
 \end{aligned} \quad (7)$$

The specific heat C_v :

$$\frac{C_v}{k_B} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\beta}{T} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (8)$$

As a remark, the critical temperature T_c is the transition temperature between a ferrimagnetic system and a paramagnetic system. Furthermore, the compensation temperature T_{comp} is the temperature where the total magnetization disappears the first time or the intersection between the absolute values of sublattice magnetizations.

$$|M_S(T_{\text{comp}})| = |M_\sigma(T_{\text{comp}})| \quad (9)$$

and

$$\text{sign}(M_S(T_{\text{comp}})) = -\text{sign}(M_\sigma(T_{\text{comp}})) \quad (10)$$

With $T_{\text{comp}} < T_c$, where T_c is critical temperature and T_{comp} the compensation temperature of the system. At each temperature, the data are obtained between -3×10^5 and

2×10^5 Monte Carlo steps (MCSS) per spin, which are used for determining averages of thermodynamic quantities after discarding 10^5 initial (MCS) for equilibration.

3. Results and discussion

First of all, we have verified the effects of the exchange interactions J_σ , J_{int} and the longitudinal crystal field on magnetic properties such as total and sublattice longitudinal magnetizations, total susceptibility, total specific heat, and internal energy is presented by equations 2, 3, 4, 5 and 6. We also examined the compensation phenomenon and the hysteresis loop behavior with various physical parameters. To simplify the system, we took $k_B = 1$, and the reduced the interactions exchange $R = \frac{J_{\text{int}}}{J_S}$ and $R_1 = \frac{J_\sigma}{J_S}$.

In Fig. 2(a-e), for different negative values of exchange interaction ($R = -0.05, -0.1, -0.2$) with fixed values $h = 0$, $D/J_S = 0$ and $R_1 = 0.2$, we showed the behaviors of total longitudinal and sublattice magnetizations, mainly S -layer and σ -layer (M_S and M_σ) are described by equations 2, 3 and 4, the total susceptibility is defined by equation 5, the specific heat is given by equation 7, and total internal energy is given by equation 6. In Fig. 2(a), we examined the effect of temperature T/J_S on the total longitudinal magnetization M_T . We can see that the total ferrimagnetic magnetization curve started increasing at $M_T = 0.5$ and vanished at two points. The first point corresponds to the

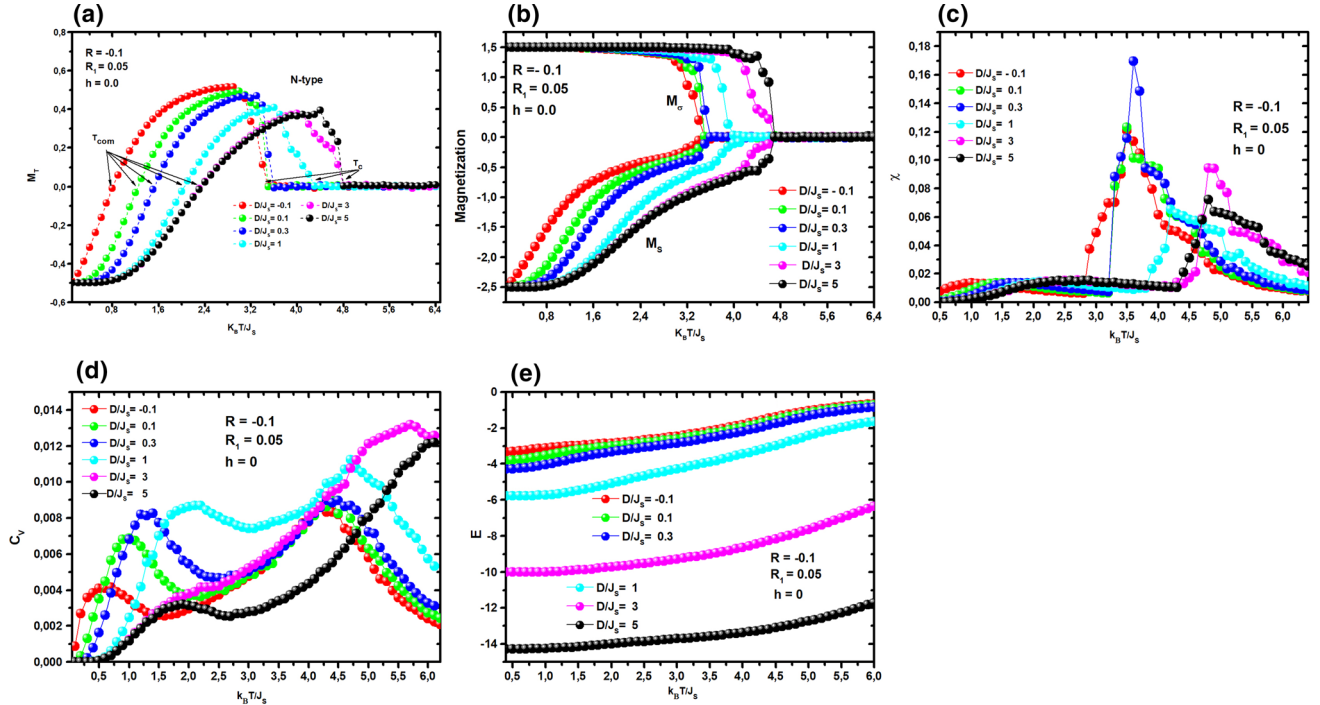


Fig. 4 Temperature dependence of the total longitudinal magnetization M_T (a), sublattice magnetizations per spin M_σ and M_S (b), total magnetic susceptibility (c), specific heat (d) and total internal energy

(e), of a hexagonal Ising ferrimagnetic nanowire with alternate S -layer and σ -layer for selected values of $(D/J_S = -0.1, 0.1, 0.3, 1.0, 3.0, 5.0)$, with fixed values of $R = -0.1$, $R_1 = 0.05$, and $h = 0.0$

N-type compensation temperature that has been described by Néel's theory in [63] and given the mentioned by equations 9 and 10. The second temperature corresponds to the critical temperature. The variation of compensation temperature as a function of exchange interactions was found and discussed for a square lattice with mixed spin $(3/2, 5/2)$ Ising by N. De La Espriella [64]. The two temperatures increased with the decrease in the antiferromagnetic exchange interactions R . In Fig. 2(b), we noticed that these two temperatures are rising with the increase in longitudinal magnetization of S -layer at its minimum value $M_S = -2.5$ and with the decrease in the longitudinal magnetization of σ -layer monotonically at maximum value $M_\sigma = 1.5$. Moreover, the two magnetizations M_S and M_σ vanish at the critical temperature T_c , while the sublattice magnetizations for $R = -0.2$ are discontinuous which means that the system exhibits a first-order phase transition. These discontinuities have been tried before in mixed Ising models in the presence of magnetic fields [64, 65]. Moreover, the system seems to undergo a second-order phase transition if R increases toward $R = -0.05$. In Fig. 2(c) and d, the same behavior is observed, with total susceptibility and the specific heat. The curves have two peaks. The first one corresponds to the compensation temperature T_{com} and the second one to the critical temperature T_c ($T_{comp} < T_c$). These peaks mount to the highest temperatures with a R decrease. For Fig. 2(e), we showed

the effect of temperature on the internal energy of the system for different values of R . Therefore, we can see that internal energy is minimal at low temperature and then increased closer to the critical temperature of the system. And there is a fluctuation of internal energy at the compensation temperature, and this behavior corresponds to the second phase of transition. The energy increases with respect to larger values of R and specially for temperatures below T_c , whereas in Fig. 3(a–e), we examined the influence of total and sublattice longitudinal magnetizations (M_T , M_S and M_σ) cited by equations 2, 3 and 4, the total susceptibility given by equation 5, the specific heat presented by equation 8 and total internal energy mentioned by equations 6 and 7 for different positive values of exchange interactions ($R_1 = 0.07, 0.1, 0.2$) with $D/J_S = 0$, $R = -0.1$ and $h = 0$. In Fig. 3(a), the total ferrimagnetic magnetization M_T increases at minimal point $M_T = -0.5$ and vanishes at two points (T_{com} , and T_c) as mentioned above. Therefore, the N-type behavior of total magnetization has been detected, and Néel has described this behavior in [63]. Moreover, the compensation and critical temperatures rise with the increase in exchange interactions R_1 . This compensation behavior was detected by Deviren et al in dynamic study of mixed spin $(3/2, 5/2)$ [53], and this temperature increases with increasing the exchange interaction. In Fig. 3(b), we noticed that two sublattice magnetizations M_S and M_σ , vanished according to the

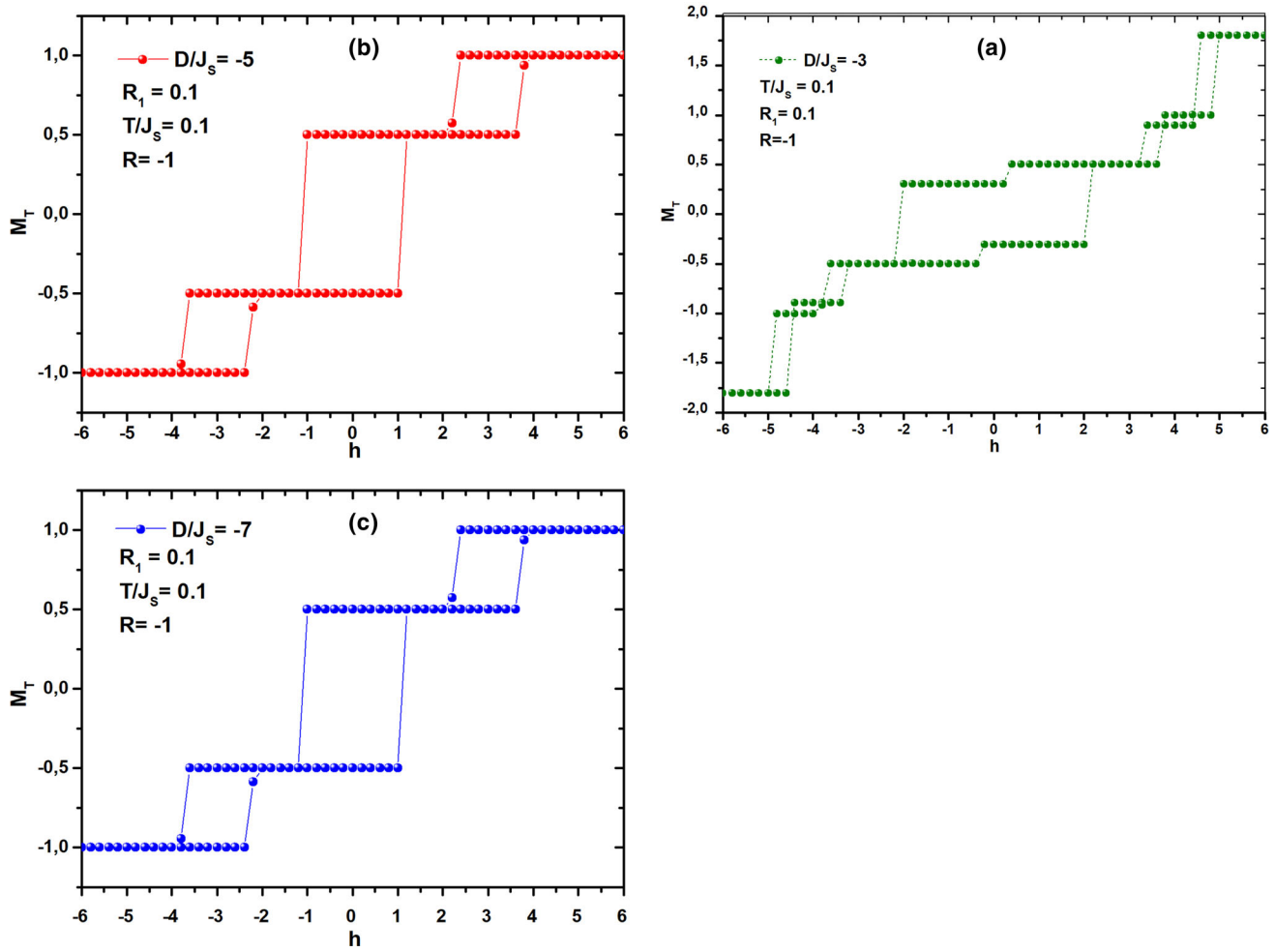


Fig. 5 Hysteresis loops (the longitudinal external field h dependence of the total longitudinal magnetization $|M_T|$) for selected negative values of $D/J_S = -3.0$ (a), $D/J_S = -5.0$ (b), $D/J_S = -7.0$ (c), and for fixed values of $R = -1.0$, $R_1 = 0.1$ and $T/J_S = 0.1$

critical temperature T_c . However, if we increase the exchange interaction R_1 , T_c increases. We also observed that the system presents the second-order phase transition for $R_1 = 0.2$, and a first-order phase transition for $R_1 = 0.1$ and $R_1 = 0.07$. In Fig. 3(c) and (d), as mentioned before, the curves of total magnetic susceptibility and total specific heat have, respectively, two peaks at compensation and critical temperatures. In Fig. 3(e), we presented the internal energy of the system as a function of the reduced temperature. Accurately, we could see that internal energy went up just near the critical temperature of the system. Thus, it moves but unstably owing to a certain compensation temperature fluctuation. That is when the energy decreases with increasing of R_1 .

We also studied the effects of longitudinal crystal field D/J_S on magnetic properties with fixed values of R , R_1 and h at $R = -0.1$, $R_1 = 0.05$ and $h = 0$. In this case, we had the same results, the compensation and critical temperature have been obtained, both temperatures come to increase with increasing of longitudinal crystal field D/J_S . This

behavior was found by J. A. Reyes et al [65], and by N. De La Espriella [64], they showed that the compensation temperature is increased with the increase in the longitudinal crystal field, while the shape of total magnetization exhibits the N-type behavior was introduced by Néel's theory in [63], and the two sublattice magnetizations M_G and M_S of the system shift to phase transition of second order in Fig. 4(a) and (b). But below $D/J_S \approx 0.5$ the two sublattice magnetizations are discontinuous due to the effect of the longitudinal crystal field, which explains why the system presents a first-order phase transition. This discontinuity of magnetization (first-order phase transition) was observed in [64]. In Fig. 4(c) and (d), we also examined the effect of longitudinal crystal field D/J_S on total susceptibility χ and specific heat. Therefore, the curves present a peak at the critical temperature T_c , and its behavior is similar to magnetization, whereas this temperature increases if the longitudinal crystal field D/J_S increasing to positive values. The effect of D/J_S on the internal energy is noticed in Fig. 4(e), where we have the

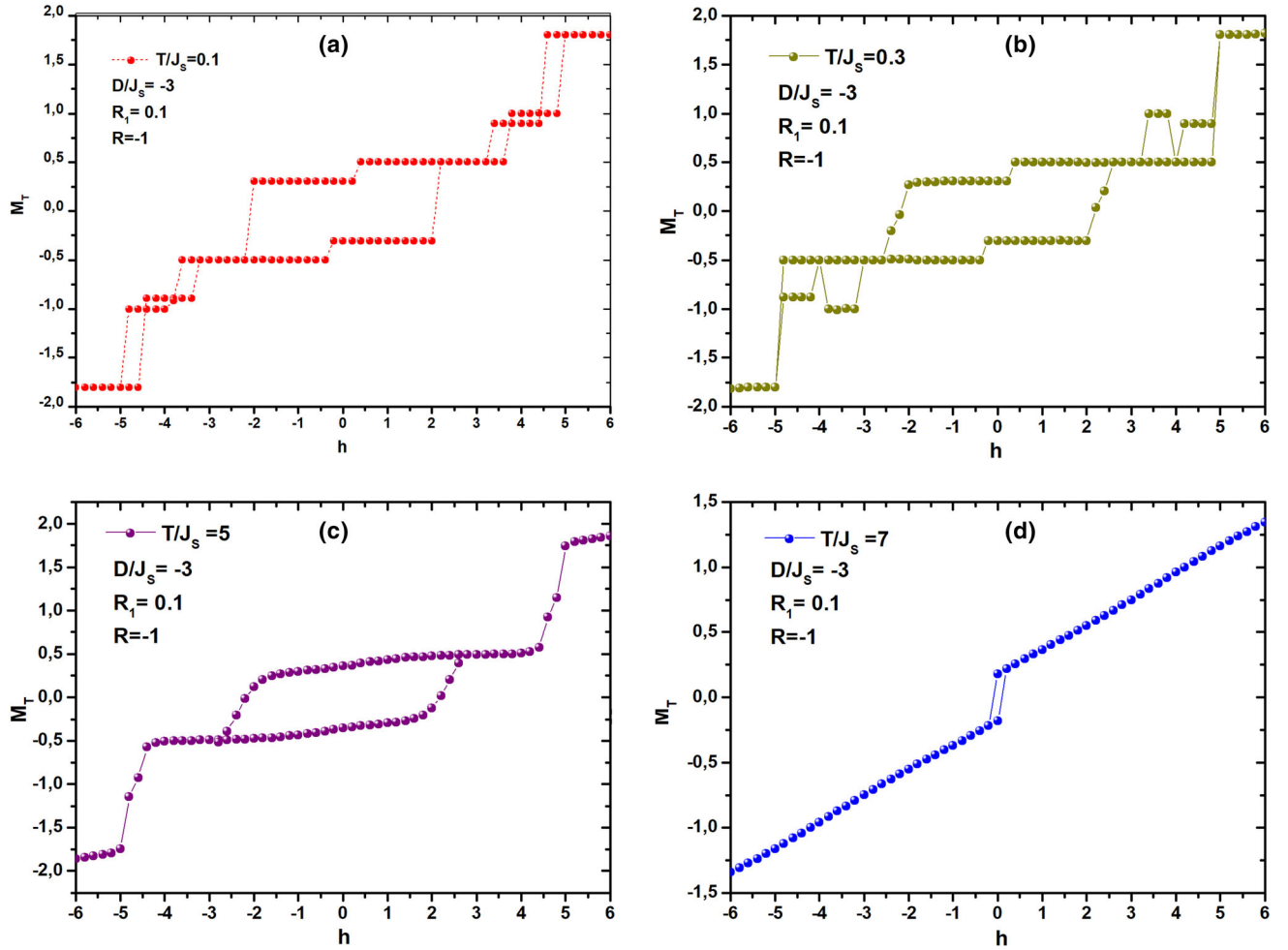


Fig. 6 Hysteresis loops (the longitudinal external field h dependence of the total longitudinal magnetization $|M_T|$) for fixed values of $R = -1.0$, $R_1 = 0.1$, and $D/J_s = -3.0$, with selected values of $T/J_s = 0.1$ (a), $T/J_s = 0.3$ (b), $T/J_s = 5$ (c), $T/J_s = 7$ (d)

same results where the internal energy increases with the decrease in longitudinal crystal field sharply near the critical temperature.

In the upcoming paragraphs, we investigated the effect of longitudinal crystal field D/J_s , the temperature T/J_s and the exchange interactions R on the hysteresis loops. In Fig. 5(a–c), in the presence of an external magnetic field h , the total magnetization curves have been examined for various values of the adapted parameters D/J_s and the fixed values of $R = -1.0$, $R_1 = 0.1$ and $T/J_s = 0.1$. Besides, we can see that there is some symmetry about hysteresis loops curves for positive and negative values of external magnetic fields. As a result, the appearance of multiple hysteresis loops or the disappearance of them is under specific conditions because of the various values of the longitudinal crystal field. For example, Fig. 5(a) presents seven loops when $D/J_s = -3.0$ and when we decrease or increase the longitudinal crystal field, the number of hysteresis loops decreases simultaneously in Fig. 5(b) and (c). This multi-loop phenomenon was found

by L. Sun et al on the diluted ferrimagnetic mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising system [66].

In Fig. 6(a–d), we increase the temperature of the system T/J_s in a certain condition used before on Fig. 5(a) ($R = -1.0$, $D/J_s = -3.0$, and $R_1 = 0.1$.) to study the effect of temperature on the hysteresis loops. As a result, the seven magnetic hysteresis loops have been also observed at low-temperature $T/J_s = 0.1$; therefore, the hysteresis loops disappear because the temperature increases. Q. Li et al observed that the rectangle Ising nanoribbon with mixed spins present the behavior of multi-loop under different effects [67].

Figure 7(a–d) presents the effect of the exchange interactions R on the hysteresis loops behaviors of the system for selective values done before on Fig. 5(a) ($D/J_s = -3.0$, $R_1 = 0.1$, and $T/J_s = 0.1$). Another outcome is added and verified similarly to the former result. The number of hysteresis loops decreases once R increases to the positive values $R = 1.5$ and the central (magnetic coercive field) becomes wider. The multi-loop

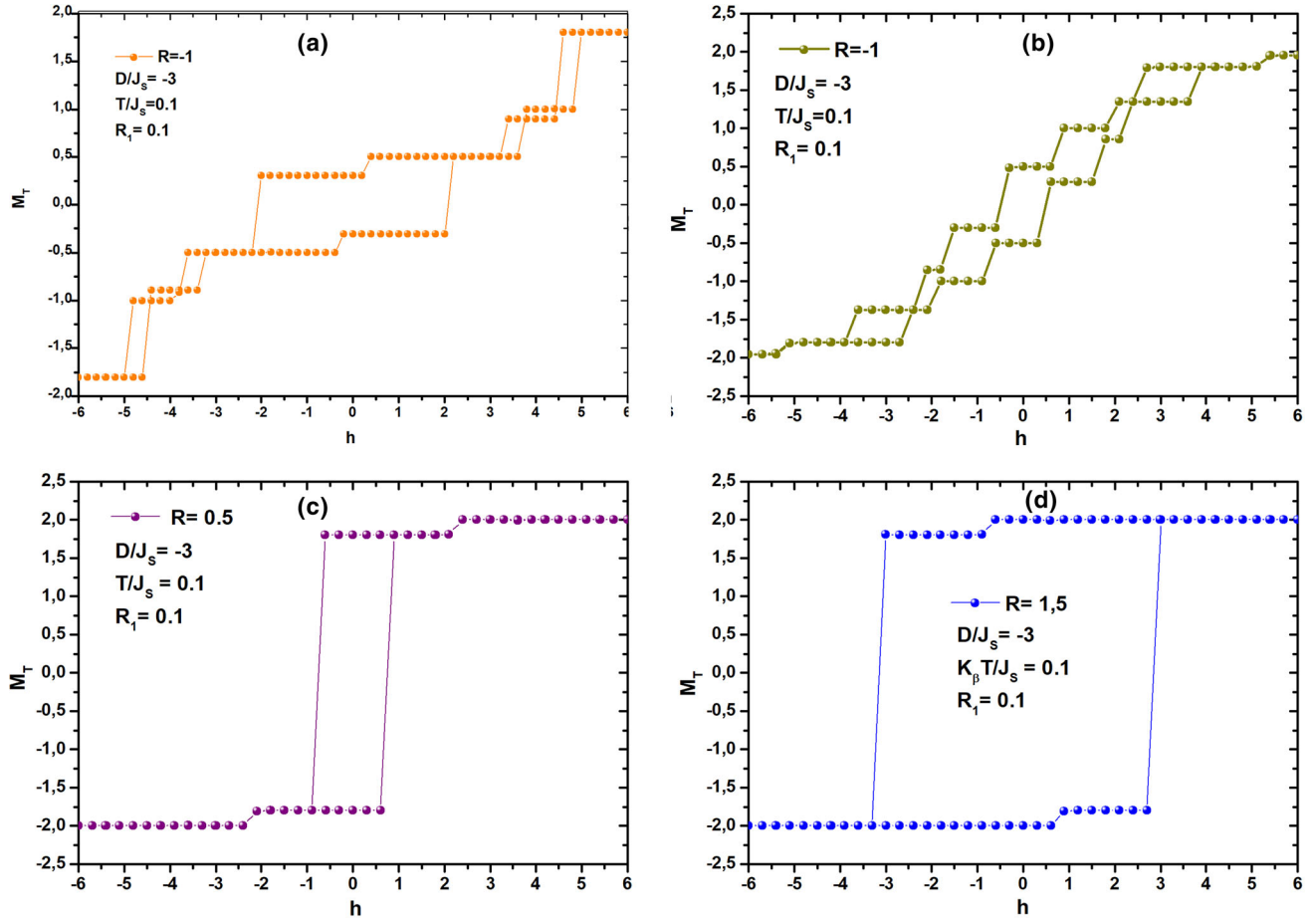


Fig. 7 Hysteresis loops (the longitudinal external field h dependence of the total longitudinal magnetization $|M_T|$) for selected values of $R = -1$ (a), $R = -0.5$ (b), $R = 0.5$ (c), $R = 1.5$ (d), the values of R_1 , D/J_S , and T/J_S are fixed at $R_1 = 0.1$, $D/J_S = -3$, and $T/J_S = 0.1$

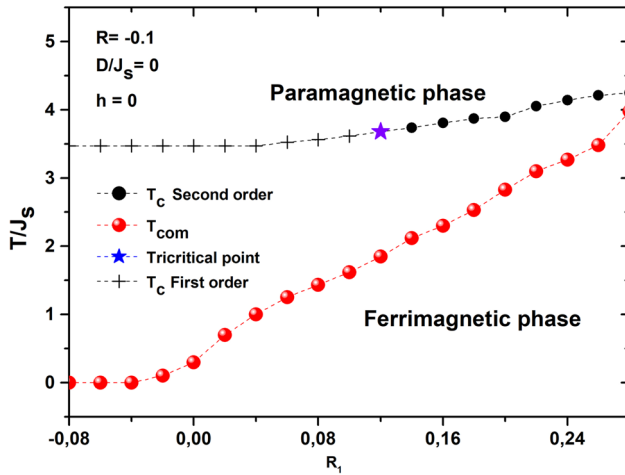


Fig. 8 The phase diagram of the nanowire system; the exchange interaction R_1 dependence of the temperature T/J_S for fixed values $R = -0.1$, $D/J_S = 0$, and $h = 0$ in the $(T/J_S, R_1)$ plan. The blue point denotes the tricritical point

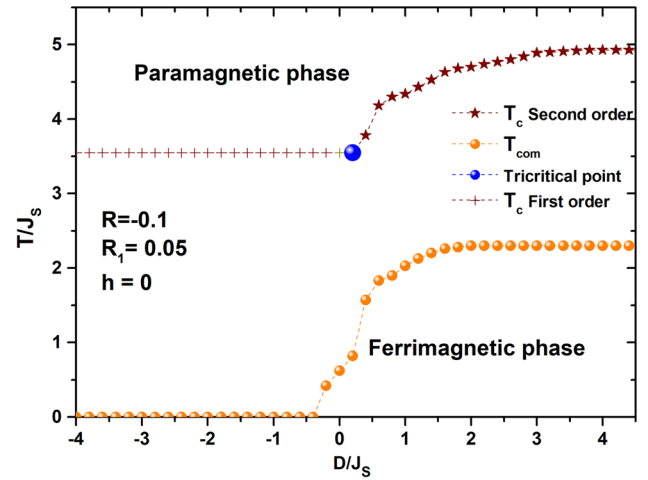


Fig. 9 The phase diagram of the nanowire system; the longitudinal crystal field D/J_S dependence of the temperature T/J_S for fixed values $R = -0.1$, $R_1 = 0.05$, and $h = 0$ in the $(T/J_S, D/J_S)$ plan. Blue star denotes the tricritical point

phenomenon has been already verified under these effects in [66, 67]. In Fig. 8, for the fixed values of $D/J_S = 0.0$, $h = 0.0$, and $R = -0.1$, we investigated the effect of the exchange interactions R_1 on the critical and the compensation temperatures (T_c and T_{com}) (the phase diagram in $(T/J_S, R)$ plan). We can see that the total magnetization exhibits a discontinuity at the critical temperature (T_c) which gives a first-order transition below $R_1 \approx 0.12$. The tricritical exchange interactions exist at $R_1 \approx 0.12$. Then, the critical temperature T_c remains unchanged until the value of $R_1 = 0.06$ then increases with increasing R_1 . On the other hand the compensation temperature T_{com} inside $R_1 = -0.04$ remains unchanged, but when R_1 increases T_{com} increases proportionally. This first-order behavior and the tricritical point were already found in [64, 65]. B. Deviren et al found the phase diagrams contain the dynamic tricritical point, the compensation behavior, the first transition lines and other important results [53]. In Fig. 9, we investigated the thermodynamic phase diagram in the $(T/J_S, D/J_S)$ plan (the crystal longitudinal field effect on the temperature) with constant values of $R_1 = -0.05$, $R = -0.1$, and $h = 0.0$. The results obtained confirmed that the transitions below $D \approx 0.2$ are first order, because the total magnetization exhibits a discontinuity at the critical temperature (T_c). At $D \approx 0.2$ the system presents the tricritical point. Above $D \approx 0.2$ the system undergoes with the phase transition of the second order. The compensation temperature T_{com} remains unchanged near zero below $D \approx 0.4$. Then for the positive values of D/J_S the two temperatures (T_c , T_{com}) increase with increase in D/J_S . These results have been discussed theoretically in mixed spin (3/2, 5/2) in [53, 64, 65].

4. Conclusions

In conclusion, using Monte Carlo simulation technique based on the Metropolis algorithm, we studied the thermal variations of magnetic properties, hysteresis loops and compensation behavior of a ferrimagnetic mixed spins-(3/2, 5/2) hexagonal Ising nanowire with alternate layers. The effects of exchange interactions R , R_1 and longitudinal crystal field D/J_S on the magnetic properties such as the total and sublattices magnetizations, the total susceptibility, the total specific heat and the internal energy are examined in detail. The magnetic hysteresis behavior of a function of exchange interactions R_1 , temperature T/J_S and the longitudinal crystal field D/J_S have been also investigated for selected physical parameters. The numerical results showed that the system exhibits one compensation behavior. The first- and second-order phase transition have been found. As discussed in this work, the system can exhibit tricritical behavior depending on the value of D/J_S and R_1 .

Furthermore, seven hysteresis loops are obtained at low temperatures and for the negative values of D/J_S . This behavior disappears with increasing the temperature T/J_S and D/J_S . Our results are consistent with theoretical studies [53, 63–67] and experimental outcomes [68, 69].

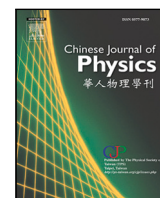
Acknowledgements The authors would like to acknowledge financial support from the Centre National for Scientific and Technical Research(CNRST), Morocco.

References

- [1] V V Pokropivny and V V Skorokhod *Mater. Sci. Eng. C* **27** 39 990 (2007)
- [2] B A Yaroslavl'tsev, I A Stenina, T L Kulova, A M Skundin and A V Desyatov *Compreh. Nanosci. Nanotechnol.* **5** 165 (2019)
- [3] E Ahlberg, U Palmquist, N Simic and R Sjövall *J. Power Sources* **85** 245 (2000)
- [4] P G Bruce, B Scrosati and J M Tarascon *Angew. Chem.* **120** 2972 (2008)
- [5] K M Bhattarai, K K Mishra, A A Instan, P B Bastakoti and S R Katiyara *Appl. Surf. Sci.* **490** 451 (2019)
- [6] S P Gubin, Y I Spichkin, G Y Yurkov and A M Tishin *Russ. J. Inorg. Chem.* **47** S32 (2002)
- [7] M Virumbrales, V Blanco-Gutiérrez, A Delgado-Cabello, R Sáez-Puche and M J Torralvo *Russ. J. Alloys Compd.* **767** 559 (2018)
- [8] L A S De Oliveira, A Pentón-Madrigal, A P Guimarães and J P Sinnecker *J. Magn. Magn. Mater.* **401** 890 (2016)
- [9] P Post, M Bierwirth and A P Weber *J. Aerosol Sci.* **126** 33 (2018)
- [10] I J Beyerlein et al *Mater. Today* **16** 443 (2013)
- [11] W Hao et al *Thin Solid Films* **505** 77 (2006)
- [12] J E Wegrowe, D Kelly, Y Jaccard, P Guittienne and J P Ansermet *Europhys. Lett.* **45** 626 (1999)
- [13] A Fert and L Piraux *J. Magn. Magn. Mater.* **200** 338–358 (1999)
- [14] F D Guerra, M F Attia, D C Whitehead and F Alexis *Molecules* **23** 1760 (2018)
- [15] D W Elliott and W X Zhang *Environ. Sci. Technol.* **35** 4922 (2001)
- [16] N Lupu, M Lostun and H Chiriac *J. Appl. Phys.* **1107** 09E315 (2010)
- [17] X Yang and I W Chen *Sci. Rep.* **2** 1 (2012)
- [18] M H M Ara, Z Dehghani and E S Iranizad *Int. J. Nanotechnol.* **6** 1006 (2009)
- [19] S Nie and S R Emory *Science* **275** 1102 (1997)
- [20] W Göpel *Biosens. Bioelectron.* **13** 723 (1998)
- [21] H Zeng, J Li, J P Liu, Z L Wang and S Sun *Nature* **420** 395 (2002)
- [22] N S Xu and S E Huq *Mater. Sci. Eng. Rep.* **48** 47 (2005)
- [23] B Maa, A Sun, X Gao, X Bao and J Li *J. Magn. Magn. Mater.* **467** 114 (2018)
- [24] Z N Yang, W Cui, Y Zhang and X I E Yan *Trans. Nonferr. Met. Soc. China* **25** 832 (2015)
- [25] D Q Han, D H Yin, J Ma, F Wang and C L Li *Ceram. Int.* **44** 22997 (2018)
- [26] J J Gu, L H Liu, Y K Qi, Q Xu and H Y Sun *Adv. Mater. Res.* **233–235** 1799 (2011)
- [27] L Kang, C Cui, W Yang and J Guo *Superlatt. Microstruct.* **107** 246 (2017)
- [28] Q Wang, X Yang, S Li, Y Chen, H Zhang and H Yang *J. Magn. Magn. Mater.* **320** 3297 (2008)

- [29] N De La Espriella, C A Mercado and J C Madera *J. Magn. Magn. Mater.* **401** 22 (2016)
- [30] N De La Espriella, C A Mercado and G M Buendía *J. Magn. Magn. Mater.* **417** 30 (2016)
- [31] W Jiang and J Q Huang *Phys. E: Low-dim Syst. Nano* **78** 115 (2016)
- [32] Y Liu et al *Phys. B: Condens. Matter* **541** 79 (2018)
- [33] M Zukovic and A Bobák *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* **389** 5402 (2010)
- [34] B Deviren, M Keskin and O Canko *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* **388** 1835 (2009)
- [35] E Albayrak and M Karimou *Chin. J. Phys.* **55** 1361 (2017)
- [36] E Kantar *J. Superconduct. Novel Magn.* **28** 2865 (2015)
- [37] E Kantar, B Deviren and A Keskin *Eur. Phys. J. B* **86** 1 (2013)
- [38] A Arbaoui, K Htoutou, L B Drissi and R Ahl Laamara *J. Supercond. Novel Magn.* **134** 3413–3423 (2021)
- [39] B Deviren, E Kantar and M Keskin *J. Korean Phys. Soc.* **56** 1738 (2010)
- [40] J D Alzate-Cardona, D Sabogal-Suárez and E Restrepo-Parra *J. Magn. Magn. Mater.* **429** 34 (2017)
- [41] N De La Espriella and G M Buendía *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* **389** 2725 (2010)
- [42] Y Yang, W Wang, D Lv, J P Liu, Z Y Gao and Z Y Wang *J. Phys. Chem. Solids* **120** 109 (2018)
- [43] W Guo-Zhu and M Hai-Ling *Commun. Theor. Phys.* **51** 756 (2009)
- [44] E Albayrak and A Yigit *Phys. Lett. A* **353** 121 (2006)
- [45] N De La Espriella and G M Buendía *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 176003 (2011)
- [46] X H Luo, W Wang, D D Chen and S Y Xu *Phys. B: Condens. Matter* **491** 51 (2016)
- [47] B Ma and W Jiang *IEEE Trans. Magn.* **47** 3118 (2011)
- [48] R Masrour, L Bahmad and A Benyoussef *J. Magn. Magn. Mater.* **324** 3991 (2012)
- [49] Y Benhouria, I Essaoudi, A Ainane, R Ahuja and F Dujardin *Ferroelectrics* **507** 58 (2017)
- [50] Z Vatansever *Phys. B: Condens. Matter* **545** 397 (2018)
- [51] M Keskin and M Ertas *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* **496** 79 (2018)
- [52] M Ertas and A Yilmaz *Comput. Condens. Matter* **14** 1 (2018)
- [53] B Deviren and M Keskin *J. Stat. Phys.* **140** 934 (2010)
- [54] M Keskin and M Ertas *Phase Transit.* **93** 361 (2020)
- [55] E Kantar and Y Kocakaplan *J. Magn. Magn. Mater.* **393** 574 (2015)
- [56] M Ertas and E Kantar *Phase Transit.* **88** 567 (2015)
- [57] M Ertas and A Yilmaz *Comput. Condens. Matter* **14** 1 (2018)
- [58] E Kantar *Phase Transit.* **89** 971 (2016)
- [59] R Weiss, A Gold and J Turner *Chem. Rev.* **106** 2550 (2006)
- [60] K Htoutou, B Nmaila, M Madani, L B Drissi and R Ahl Laamara *Mater. Res. Express* **4** 116108 (2017)
- [61] B Nmaila, K Htoutou, L B Drissi and R A Laamara *Solid State Commun.* **336** 114418 (2021)
- [62] K Binder *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Berlin: Springer) (1991)
- [63] J S Smart *Am. J. Phys.* **23** 356 (1955)
- [64] N De La Espriella and G M Buendía *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 176003 (2011) **252** 2268 (2015)
- [65] L A Reyes, N De La Espriella and G M Buendía *B Solid State Phys.* **252** 2268–2274 (2015)
- [66] Q Li et al *Physica A* **555** 124741 (2020)
- [67] L Sun et al *J. Magn. Magn. Mater.* **528** 167820 (2021)
- [68] H Zhou, Y Yiu, M C Aronson and S S Wong *J. Solid State Chem.* **181** 1539 (2008)
- [69] H W Wu, C J Tsai and L J Chen *Appl. Phys. Lett.* **90** 043121 (2007)

Publisher's Note Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Phase diagrams and hysteresis loops of a ferrimagnetic mixed spin-(3/2, 5/2) hexagonal Ising nanotube with core-shell structure

B. Nmaila^a, A. Kadiri^b, A. Arbaoui^a, L.B. Drissi^{a,c,d}, R. Ahl Laamara^{a,c}, K. Htoutou^{a,e,*}

^a LPHE-MS, Laboratory of High Energy Physics-Modeling & Simulations, Department of physics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Morocco

^b Laboratory of Condensed Matter and Interdisciplinary Sciences (LaMCSi), Faculty of Sciences, Mohammed V University, Rabat, Morocco

^c CPM, Center of Physics and Mathematics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Morocco

^d Hassan II Academy of Sciences and Technology, Rabat, Morocco

^e CRMEF, Regional Center for Education and Training Profession, Department of physics, Fes-Meknes, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

Monte Carlo simulation
Ferrimagnetic mixed-spins
Ising nanotube
Phase diagrams
Compensation phenomenon
Hysteresis loops
Longitudinal crystal field

ABSTRACT

Within the framework of Monte Carlo simulation based of the Metropolis algorithm, we investigated the magnetic properties of a ferrimagnetic mixed-spins (3/2, 5/2) Ising nanotube with a hexagonal core-shell structure. The effects of the longitudinal crystal field of the shell sublattice D_{sh} , of different exchange couplings J_{sh} and J_{int} have been studied in detail on magnetization behaviors, magnetic susceptibility curves, phase diagrams and also hysteresis loops. As a results, we found that the system exhibits the compensation phenomenon, the second-order phases transitions, the total magnetization can takes S, Q, and N-types shapes, as well as the triple hysteresis loops under certain values of longitudinal crystal field, exchange coupling constants and temperature. Finally, the physical phenomena obtained are qualitatively in good agreement with other experimental and theoretical results on the same system.

1. Introduction

Recently, magnetic nanoparticles (MNs) have been of great interest to researchers because of their magnetic and morphological properties [1–4]. The MNs have potential nanotechnological and industrial applications in the following fields: information storage devices [5], biomedical applications [6], shielding [7], sensors [8,9], permanent magnets [10,11] and magnetoresistive devices [12]. Indeed, the nanoparticles constituted by combining two or more magnetically coupled structures [13–17] (mixed nanotubes, core-shell...) lead to vast applications thanks to the richness of the physical and magnetic phenomena that arise from. Nanotubes can exhibit numerous critical and thermal behaviors for certain physical conditions such as: compensation phenomena, tricritical points, first and second order phase transitions and multiple hysteresis loop phenomena [18–21].

With the increasing trend toward the nanotechnology sector, several kinds of nanoparticles with coupled magnetic substructures have been successfully synthesized in the form of nanotubes [22], nanocubes [23], nanowires [24] and nanofilms [25]. Despite the Progress of the experimental technically devoted to the synthesis of magnetic nanoparticles, the experimental results are much less likely without detailed theoretical studies. In the same framework, many theoretical investigations are aimed to study the magnetic properties of the magnetic nanoparticle by using several numerical methods: Monte Carlo (MC) [26–29], Mean Field Approximation (MFA) [30,31], Effective Field Theory (EFT) [32–34], Green Function Formalism [35–37], Cluster Variation Method

* Corresponding author at: LPHE-MS, Laboratory of High Energy Physics-Modeling & Simulations, Department of physics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Morocco.

E-mail address: khadija.htoutou2021@gmail.com (K. Htoutou).

<https://doi.org/10.1016/j.cjph.2022.07.019>

Received 17 January 2022; Received in revised form 23 July 2022; Accepted 27 July 2022

Available online 6 August 2022

0577-9073/© 2022 The Physical Society of the Republic of China (Taiwan). Published by Elsevier B.V. All rights reserved.

(CVM) [38–40] and Micro-Magnetic Simulations [41–43]. Part of this contribution was focused on the study of phase diagrams, compensation points, thermal properties, and hysteresis loops. In particular, in the last few decades, advances have been made in experimental and theoretical studies on magnetic nanotubes. At present, experiments have proved that magnetic nanomaterials with a core–shell morphology such as nanotubes have been successfully processed [44–49]. For example, Chen et al. have investigated the effect of temperature and structure on the magnetic properties of Ni and Co–NiO–Ni core–shell nanotube arrays [50]. On the other hand, Khan et al. have presented a new hybrid core–shell nanostructure composed of an antiferromagnetic FeTiO₃ shell and a ferromagnetic Ni Permalloy core [51].

By using the Ising models, many efforts have been devoted to investigating the dynamic magnetic properties of the mixed-spin ferrimagnetic hexagonal nanowire [52,53], cylindrical Ising nanowire [54,55], Ising-type core/shell nanowires [56] and Ising bilayer system with a square lattice [57].

Furthermore, numerous works have been devoted to the theoretical explorations of magnetic nanotubes with core–shell structure composed of mixed-spin. Wang et al. have investigated the compensation and critical temperature of a ferrimagnetic cylindrical core–shell nanotube within the Monte Carlo simulation (MCs) in detail [58]. Utilizing the effective field theory (EFT) Taşkin et al. have examined the thermal and magnetic properties of a nanotube with spin-1/2 core and spin-3/2 shell sublattice [59]. Francisco et al. used Mean Field Theory based on the Ashkin–Teller model to study the magnetic properties of the hexagonal nanotube with core–shell structure. [60].

Moreover, the magnetic hysteresis loops of the nanotubes have also been investigated by several theoretical studies because of their interesting magnetic properties as well as thermal characteristics in physical nanotechnology. Liu et al. have examined the hysteresis behaviors, the coercivities and the remanences of the sublattices of the ferrimagnetic hexagonal nanotube with mixed-spin (1, 3/2) Ising and core–shell structure by using Monte Carlo simulation [61], they found that the system may display various hysteresis loops such as triple loops, single loops, step-like loops, and paramagnetic hysteresis curves. Masrour et al. have used the Monte Carlo Simulation to study the magnetic and thermodynamic properties of mixed-spin Ising ferrimagnetic nanotube of double core–shell walls [62], they constated that the remanent magnetization decreases when the temperature and the crystal field in an absolute value increase.

In our previous studies, we investigated the magnetic properties of a mixed spin (1/2,1) [63], (3/2,2) [64] and (3/2,5/2) [65] Ising ferrimagnetic nanowires with alternate layers using Monte Carlo simulation based on the metropolis algorithm, the compensation temperature and the multi-loop hysteresis phenomena have been found, also, the systems present a second-order phase transition. These results confirm that this system has an important use in information storage technology. The motivation for this work is to illustrate the effects of exchange interactions, longitudinal crystal field, and temperature on the magnetic properties, phase diagram, and hysteresis loops behavior of a mixed spin (3/2, 5/2) ferrimagnetic Ising nanotube composed of core–shell structure.

In the following section, we describe in detail the model and procedure of the Monte Carlo simulation based on the metropolis algorithm in Section 2. The results and discussions were treated and discussed in Section 3. Finally, in Section 4, we presented the conclusion of this paper.

2. Model and formalism

We consider a hexagonal ferrimagnetic Ising nanotube consisting of a spins-5/2 ferromagnetic core surrounded by a spins-3/2 ferromagnetic shell structure. The cross-section and three-dimensional shape of the hexagonal nanotube system are presented in Fig. 1a and Fig. 1b, the Hamiltonian of our system can be described as follows:

$$H = -J_{sh} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - J_c \sum_{\langle nm \rangle} \sigma_n^z \sigma_m^z - J_{int} \sum_{\langle in \rangle} S_i^z \sigma_n^z - D_{sh} \sum_{\langle i \rangle} (S_i^z)^2 - D_c \sum_{\langle n \rangle} (\sigma_n^z)^2 - h \left(\sum_{\langle i \rangle} S_i^z + \sum_{\langle n \rangle} \sigma_n^z \right) \quad (1)$$

Where $\sigma = \pm \frac{5}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ and $S = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ are the spin variables in the shell and the core sublattices, respectively. J_{sh} and J_c represent the exchange coupling constants between the two nearest neighbor magnetic atoms in the core $S-S$ layers, and in the surface shell $\sigma-\sigma$ layers, and ($J_{int} < 0$) are the exchange coupling constants between the core and the shell $S-\sigma$ layers. D_c and D_{sh} are the longitudinal crystal fields for core and shell sublattices, respectively. h is the external longitudinal magnetic field. The Monte Carlo calculation method is based on the Metropolis algorithm, which is an important sampling technique, a pass through the algorithm described by a test pattern and made by randomly selecting a spin, and then calculating the energy difference of the test state from the current state δE , if $\delta E \leq 0$, the test state is energetically accepted. Otherwise, a random number $0 \leq \zeta \leq 1$ is generated, and the new state is only accepted if $\exp(-\beta \delta E) > \zeta$. This condition can be rewritten as $(-\beta \delta E) > \log \zeta$, which we used in the code [66]. The MC simulations are performed for $N = (N_c + N_{sh}) \times L$ spins where N is the total number of spins in the nanotube cross-section, $N_c = 6$ denote the number of spin in the core, $N_{sh} = 12$ denote the number of spin in the surface shell, $L = 100$ is the length of the nanotube. We apply the periodic boundary conditions on the Z -direction of finite thickness L , and the free boundary conditions on the XY plane.

The two shell and core magnetizations (M_c and M_{sh}) are calculated by:

$$M_c = \frac{1}{N_c \cdot L} \left\langle \sum_n \sigma_n \right\rangle \quad (2)$$

and

$$M_{sh} = \frac{1}{N_{sh} \cdot L} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \quad (3)$$

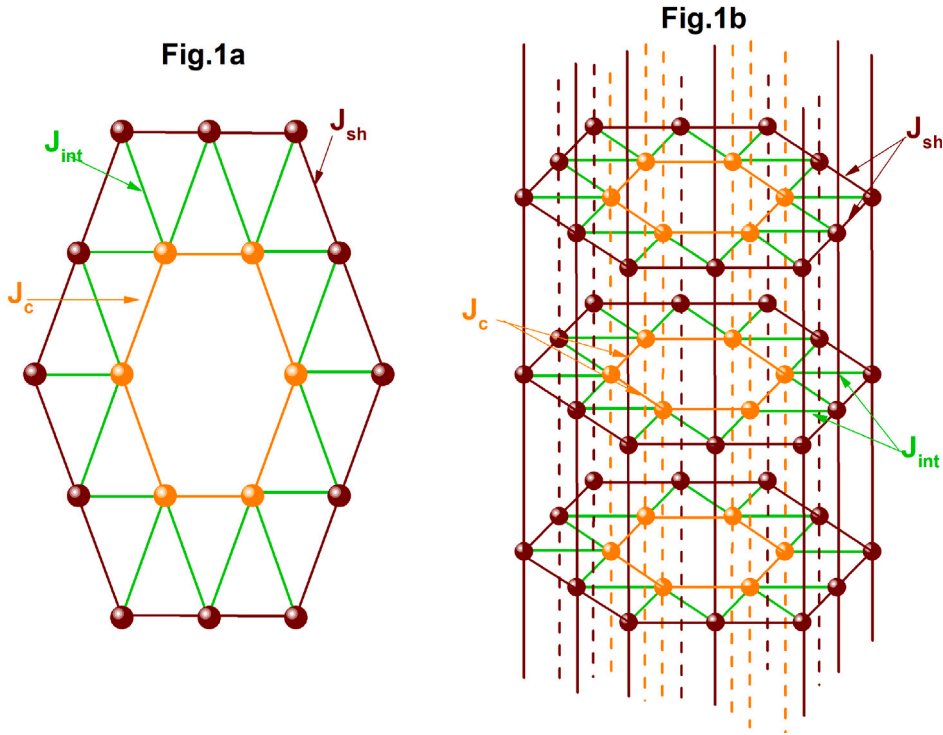


Fig. 1. Schematic representation of ferrimagnetic hexagonal Ising nanotube with core-shell structure; spin-5/2 core layers and spin-3/2 shell layers: (a) cross-section and (b) three-dimensional. The orange spheres indicate magnetic atoms (spin- $S = \frac{5}{2}$ in the core), and the chestnut spheres delegate magnetic atoms (spin- $\sigma = \frac{3}{2}$ in the shell). J_{int} the exchange coupling between core and shell layers.

The total magnetization is given by:

$$M_T = \frac{(6M_c + 12M_{sh})}{18} \quad (4)$$

And the total susceptibility χ is defined by the equation:

$$\chi = \beta N (\langle M_T^2 \rangle - \langle M_T \rangle^2) \quad (5)$$

Where $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B is the Boltzmann constant. For simplicity, we take $k_B = 1$ and T denotes the absolute temperature.

The total specific heat is such that:

$$\frac{C_v}{k_B} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\beta}{T} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (6)$$

The total magnetizations can be canceled at compensation and critical points. Thus, the first so-called compensation temperature T_{comp} is determined as the intersection point between the absolute values of two shell and core magnetizations using :

$$|M_{sh}(T_{comp})| = |M_c(T_{comp})| \quad (7)$$

and

$$\text{sign}(M_{sh}(T_{comp})) = -\text{sign}(M_c(T_{comp})) \quad (8)$$

With $T_{comp} < T_c$, where T_c is the critical temperature or the transition temperature. We can determine T_c from the maximum of the specific heat curve or in the vicinity of the maximum peak of the total susceptibility of the system.

At each temperature, the Data are obtained between 2×10^4 and 4×10^4 Monte Carlo steps (MCSS) per spin, which are used for determining averages of thermodynamic quantities after discarding 10^4 initial (MCS) for equilibration.

3. Results and discussion

In this section, we investigate the effects of the longitudinal crystal field of shell sublattice D_{sh} and exchange coupling constants (J_{sh} and J_{int}) on magnetic and thermodynamic properties. We study the evolution of the total, shell, and the core longitudinal magnetization as functions of temperature, the compensation behavior, and the critical phenomenon, as well as the hysteresis loop

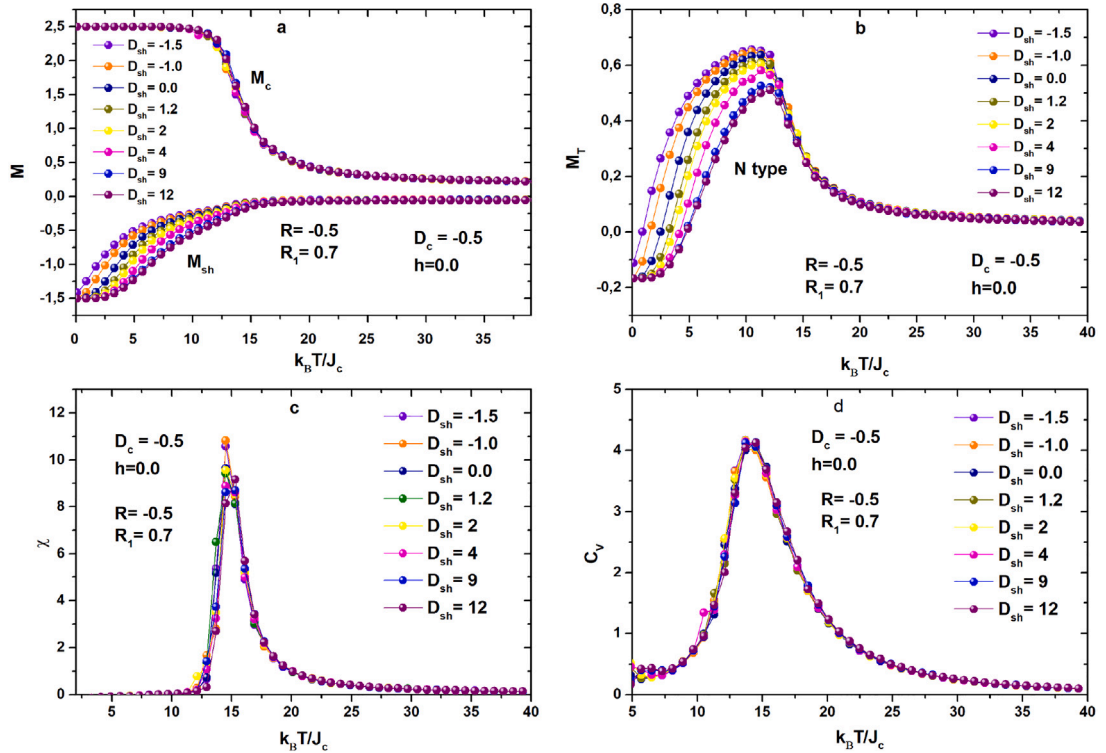


Fig. 2. The influence of temperature on the two shell and core magnetizations (M_{sh} and M_c) (a), the total magnetization M_T , (b), the total magnetic susceptibility χ (c), and the specific heat (d) of a ferrimagnetic hexagonal Ising nanotube with core-shell structure for selected values of ($D_{sh} = -1.5, -1.0, 0.0, 1.2, 2.0, 4.0, 9.0, 12.0$) with fixed values $h = 0.0$, $D_c = -0.5$, $R = -0.5$, and $R_1 = 0.7$.

behaviors of a ferrimagnetic mixed-spin (3/2,5/2) Ising nanotube with hexagonal core-shell structure. To simplify the results, we take $J_c = 1$ and the reduced exchange coupling constants are defined by $R = \frac{J_{int}}{J_c}$ and $R_1 = \frac{J_{sh}}{J_c}$.

In Fig. 2(a–d), we examine the shell and the core magnetizations (M_{sh} and M_c), the total magnetization (M_T), the magnetic susceptibility and the specific heat for negative and positive values of the longitudinal crystal field ($D_{sh} = -1.5, -1.0, 0.0, 1.2, 2.0, 4.0, 9.0, 12.0$), when $D_c = -0.5$, $R = -0.5$, and $R_1 = 0.7$. The effect of D_{sh} on the shell and the core magnetizations have been investigated in Fig. 2(a). We can observe that magnetizations decrease as functions of the temperature and vanish at the critical temperature $T_c = 15.0$ which is the transition temperature between the ferrimagnetic phase at the low-temperature region and paramagnetic phase at the high-temperature region. Moreover, for $T = 0.0$, one can notice that $M_c = -2.5$ and $M_{sh} = 1.5$, which present the saturation value ($M_T = -0.16$) defined by the following equation $M_T = ((6 \times M_c + 12 \times M_{sh})/18) = ((6 \times -2.5 + 12 \times 1.5)/18) = -0.16$. This result was found and explained by Si Nan et al. [67]. In Fig. 2(b), the M_T exhibit two successive zeros. The first one corresponds to the compensation temperature T_{com} , and the second corresponds to the critical temperature T_c . T_{com} varies proportionally to D_{sh} however T_c almost remains invariable. Remarkably, the M_T of the system exhibits standard shape N-type behavior according to Neel's theory. The same results were obtained for the total susceptibility χ_T and the specific heat C_v , respectively in Fig. 2(c–d). The curves are composed of single-peak in the vicinity of the T_c . Consequently, this peak almost remains invariable with temperature when the longitudinal crystal field D_{sh} increases. These behaviors are compared with the following theoretical results [58].

Fig. 3(a–d) shows the thermal variations of the shell and the core magnetizations, of the total magnetization M_T , the magnetic susceptibility and the specific heat with respect to different values of the exchange coupling ($R = -0.5, -1.0, -2.0, -3.0$), when $R_1 = 0.7$, $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -0.5$, and $h = 0.0$. We can see that M_c and M_{sh} curves vanish at the critical temperature T_c . We notice that the effect of the exchange interaction R on the two magnetizations is clear as indicated in Fig. 3(a). In Fig. 3(b), the total magnetization exhibits the N-type compensation behavior. Moreover, the compensation T_{com} and critical temperatures T_c increase when R decreases. As mentioned above, the curve of the total susceptibility χ_T plotted in Fig. 3(c), shows the typical susceptibility of our system with a single peak. For these figures, if the value of R increases the peaks move to the right. The curves of the specific heat C_v have been presented in Fig. 3(d), double peak phenomenon observed if ($R = -1.0$), whereas single-peak is found if ($R \neq -1.0$). These behaviors are compared with the following theoretical results [58].

Fig. 4(a–d) presents the thermal variations of the total magnetization M_T , also of the shell and the core magnetizations M_{sh} and M_c , the magnetic susceptibility, and the specific heat for different values of core exchange coupling ($R_1 = 0.1, 0.7, 1.0, 1.6, 2.0, 3.0, 4.0, 6.0, 8.0$) when $R = -0.5$, $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -0.5$, and $h = 0.0$. We observe that M_c and M_{sh} curves vanish at the

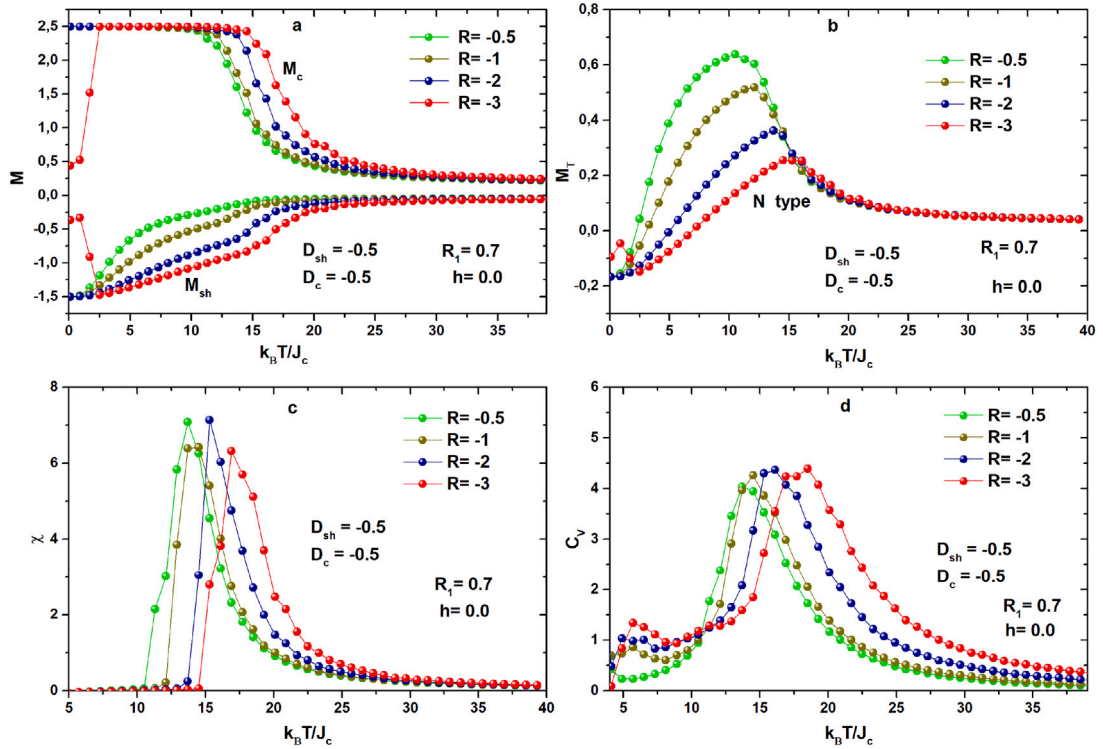


Fig. 3. The influence of temperature on the two shell and core magnetizations (M_{sh} and M_c) (a), the total magnetization M_T , (b), the total magnetic susceptibility χ_T (c), and the specific heat (d) of a ferrimagnetic hexagonal Ising nanotube with core-shell structure for selected values of ($R = -0.5, -1.0, -2.0, -3.0$), when fixed values of $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, $R_1 = 0.7$, and $h = 0.0$.

critical temperature T_c in Fig. 4(a). The effect of R_1 on M_{sh} is stronger than the effect on M_c ($0.1 \leq R_1 \leq 4.0$). In Fig. 4(b), the total magnetization exhibits various standard shape such as N-type behavior in the interval ($0.1 \leq R_1 \leq 4.0$), Q-type behavior in $R_1 = 6.0$, and S-type behavior in $R_1 = 8.0$. Moreover, T_{com} have been detected when ($0.1 \leq R_1 \leq 6.0$). We mentioned that, T_{com} and T_c vary monotonically with R_1 as indicated in Fig. 4(a–b). While, as shown in Fig. 3(a–b), they decrease as a function of R_1 . The curves of the total susceptibility χ_T and the specific heat C_v , respectively plotted in Fig. 3(c), which also shows the typical susceptibility of Ising ferrimagnetic hexagonal nanotube characterized by a single peak, and we can see from these figures that increasing the value of R_1 causes the peak to move to the right. It is interesting to note that T_c almost remains invariable in ($0.1 \leq R_1 \leq 2.0$), and increases gradually in ($2.0 \leq R_1 \leq 8.0$). These behaviors are compared with the following theoretical results [58].

In Fig. 5, we studied the phase diagrams in $(T, D_{sh}/J_c)$ plane with fixed values of $h = 0.0$, $D_c = -0.5$, $R = -0.5$ and $R_1 = 0.7$. The phase diagram presents the variation of the critical and compensation temperature T_c and T_{com} as a function of the longitudinal crystal field of shell layers D_{sh} . If we increase D_{sh} , at $T_c = 14.55$ the critical temperature almost remains invariable while the compensation temperature T_{com} increases exponentially. Moreover, this phase diagram exhibits the second-order phase transition at high temperatures. We also notice that the effect of the longitudinal crystal field of shell sublattice D_{sh} on the T_{com} is considerable compared to the effect of D_c .

The effects of the exchange coupling constant on the phase diagram in (T, R) plane have been investigated in Fig. 6 with fixed values of $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, $R_1 = 0.7$ and $h = 0.0$. The compensation temperature T_{com} had been found for various values of R . We mention that the system only displays the second-order phase transitions. Furthermore, T_c and T_{com} decrease with the increasing of R .

Fig. 7, shows the effect of exchange coupling R_1 on the critical and compensation temperature T_c and T_{com} . We notice that the system exhibits a second-order phase transition at high temperatures for ($0.0 \leq R_1$). Moreover, $T_c = 13.75$ almost remains constant in ($0.0 \leq R_1 \leq 2.0$), and increases gradually in ($2.0 \leq R_1 \leq 9.0$). We also see that the compensation temperature increases in ($0.0 \leq R_1 \leq 6.0$), which explains that this temperature is bounded by the small values of the exchange interactions. On the other hand, the two temperatures T_{com} and T_c increase with the increase of R_1 and they cross at a critical point of the exchange coupling $R_1 = 6.2$.

In this final part, we investigate in Figs. 8–10, the effects of the longitudinal crystal field of shell layers D_{sh} , the exchange coupling R , and the temperature T/J_c on the hysteresis loops behavior of the system. In Fig. 8(a–h), we display the hysteresis loops of the total system, the core and shell sublattices for fixed values $D_c = -0.5$, $R = -1.0$, $R_1 = 1.0$, $T = 1.0$ and when ($D_{sh} = 2.0, -2.0, -3.0, -4.0$). We observe that the magnetization curves are symmetrical for the positive and negative values of the external magnetic

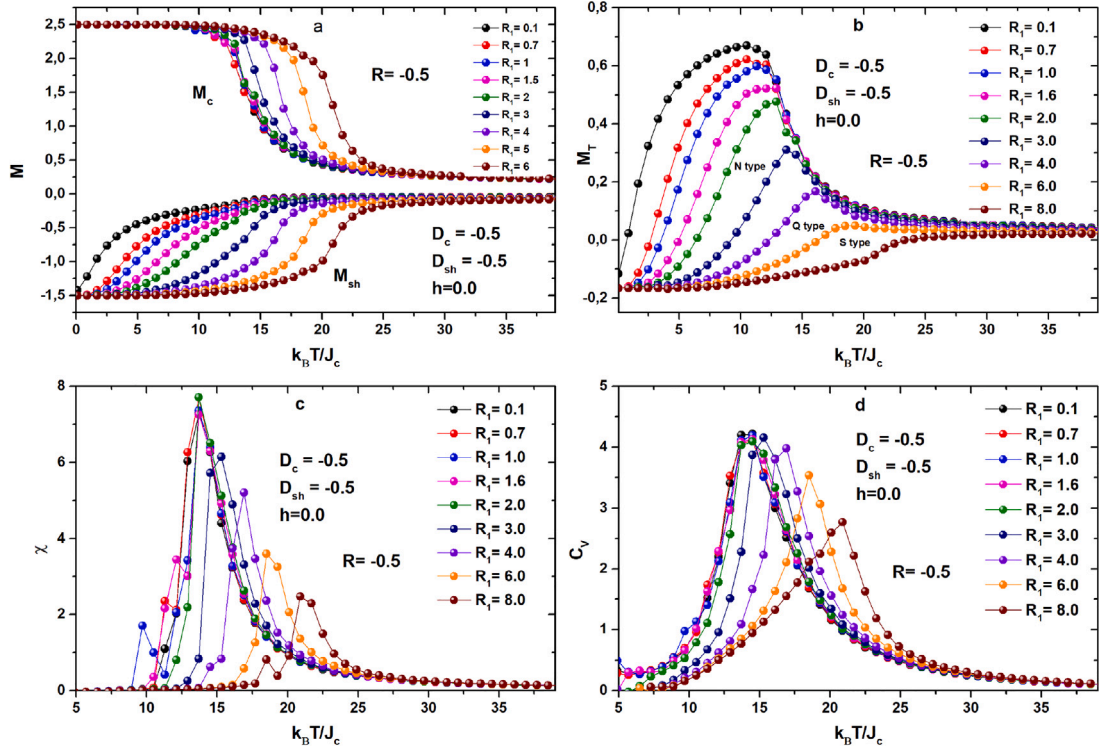


Fig. 4. The influence of temperature on the two shell and core magnetizations (M_{sh} and M_c) (a), the total magnetization M_T , (b), the total magnetic susceptibility χ (c), and the specific heat (d) of a ferrimagnetic hexagonal Ising nanotube with core-shell structure for selected values of ($R_i = 0.1, 0.7, 1.0, 1.6, 2.0, 3.0, 4.0, 6.0, 8.0$), when fixed values of $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, $R = -0.5$, and $h = 0.0$.

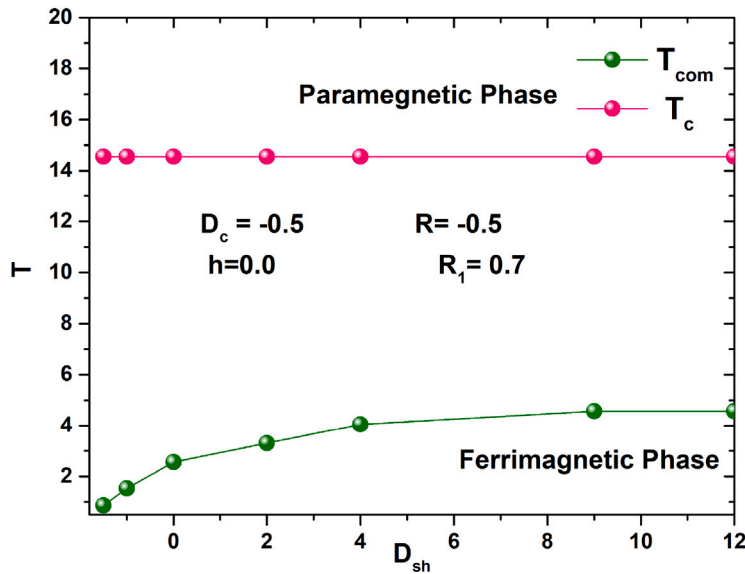


Fig. 5. The phase diagram in $(T, D_{sh}/J_c)$ plane with fixed values $h = 0.0$, $D_c = -0.5$, $R = -0.5$, and $R_i = 0.7$.

field $h = \pm 14$, the total system presents the triple hysteresis loops when $(-3.0 \leq D_{sh} \leq 2.0)$ in Fig. 8(a–c), while both core and shell sublattices show a single loop in Fig. 8(e–h). We also note that the hysteresis loops of the core are larger than those of the shell sublattice. Moreover, this interesting phenomenon disappears with the increase of the longitudinal crystal field of shell layers D_{sh} . In conclusion, the influence of D_{sh} on the hysteresis loops of the total system as well as core and shell sublattices is very important than D_c .

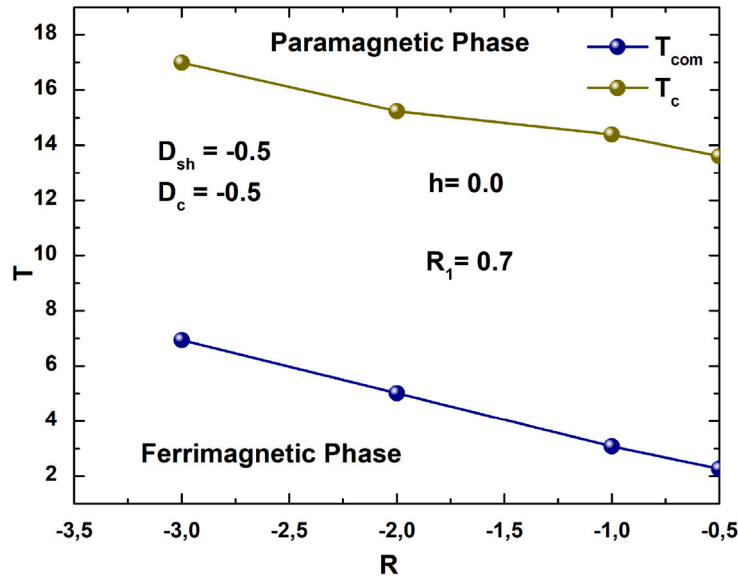


Fig. 6. The phase diagram in (T, R) plane with fixed values of $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, $R_1 = 0.7$, and $h = 0.0$.

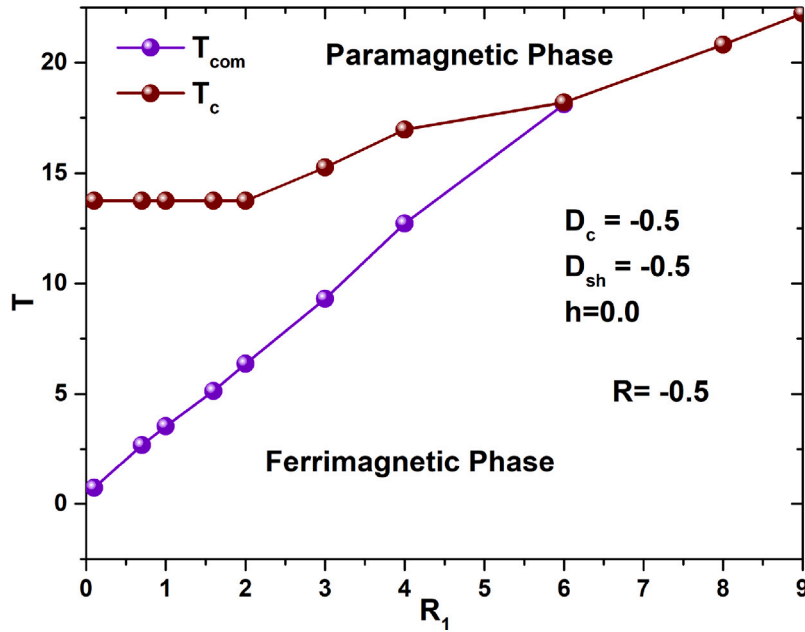


Fig. 7. The phase diagram in (T, R_1) plane with fixed values of $D_{sh} = -0.5$, $D_c = -0.5$, $R = -0.5$, and $h = 0.0$.

Fig. 9(a–i) shows the effects of temperature on the hysteresis loops behaviors of total system, the core and the shell sublattices with different values of $(T = 1.0, 4.0, 6.0, 10.0, 13.0)$ with fixed $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -1.0$, $R = -1.0$ and $R_1 = 1.0$. We see that the total system presents triple hysteresis loops at low temperature, and curves of total magnetization are symmetrical for the positive and negative values of the external magnetic field $h = \pm 14.0$. Whereas the core and the shell sublattices exhibit a single loop, and the hysteresis loops of the core sublattice are larger than those of the shell sublattice. By increasing the values of temperature to $T = 13.0$, the number of hysteresis loops disappears, the coercive field increases, and the hysteresis loops of the core and the shell sublattices decrease. Moreover, at high temperatures, the total and core-shell magnetization curves display shape S-type behavior. This similar outcomes has been observed in the studies of Ising type systems such as hexagonal nanowire [21,63], hexagonal nanoisland [29], cubic nanowire [68], nanocube [69], nano-graphene [70] and molecular-based magnetic materials [71].

Finally, Fig. 10(a–h) illustrates the effects of the exchange coupling R_1 on the hysteresis loops of the total system, of the core and the shell sublattices for selected values of $(R_1 = 3.0, 1.0, -1.0, -2.0)$, and with fixed values of $D_c = -0.5$, $D_{sh} = -1.0$, $R = -1.0$

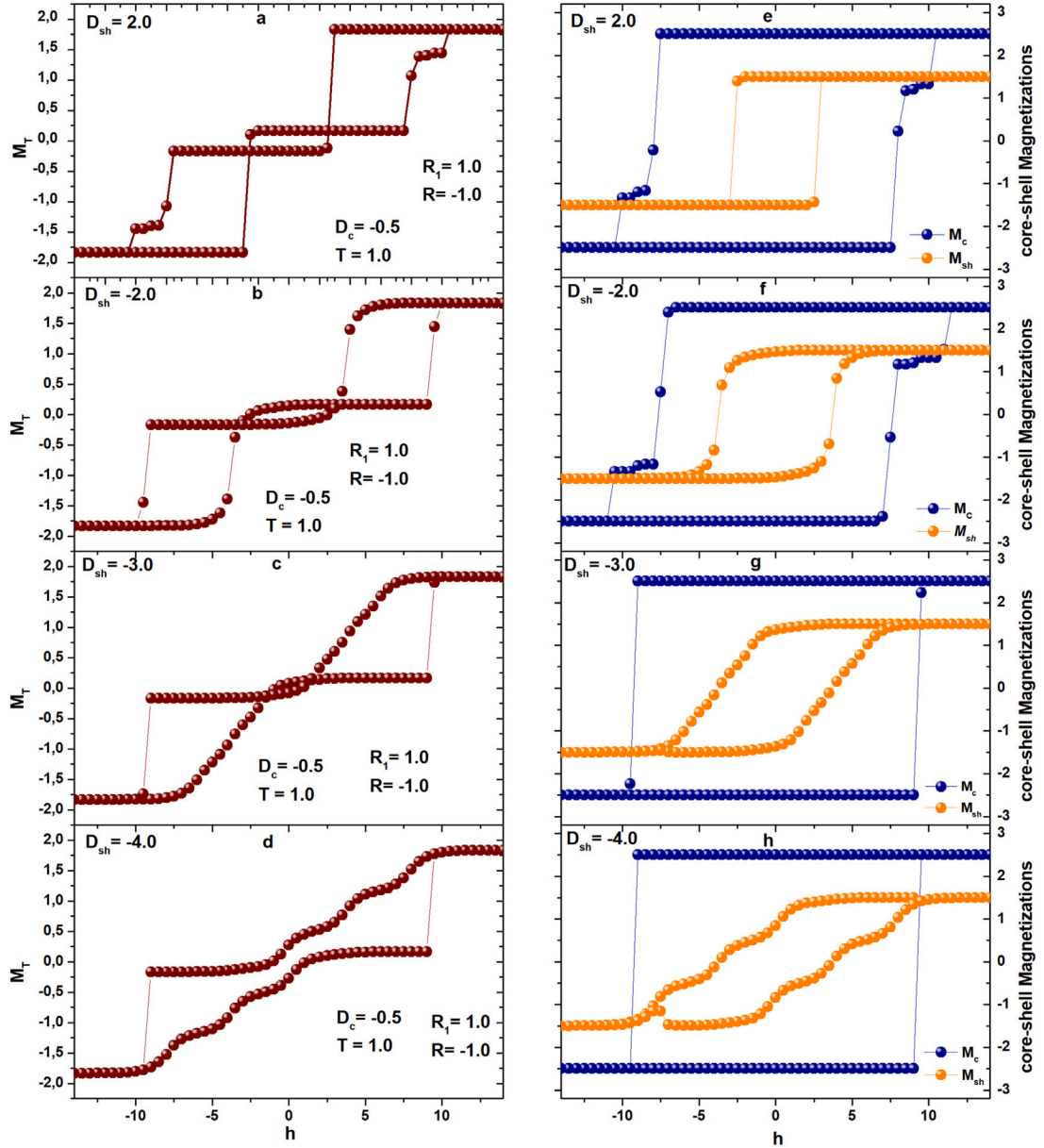


Fig. 8. The hysteresis loops for selected values of ($D_{sh} = 2.0, -2.0, -3.0, -4.0$) when fixed values of $D_c = -0.5$, $R = -1.0$, $R_1 = 1.0$, and $T = 1.0$ (a–d) for the total system; (e–h) for core and shell sublattices.

and $T = 1.0$. We can observe that the total magnetization curves are symmetrical for positive and negative magnetic field values, and exhibit triple hysteresis loops at exchange coupling $R_1 = 1.0$, these multiple hysteresis loop behaviors are mainly due to the competition between the core–shell exchange interactions, the longitudinal crystal field D_{sh} and the external magnetic field applied to the system. However, by decreasing values of R_1 to $R_1 = -2.0$, the three loops become a single loop at $R_1 = -2.0$. Moreover, the single hysteresis loop of the core sublattice becomes narrower. On the other hand, the hysteresis loop of shell sublattice has disappeared.

4. Conclusions

In summary, we have studied the effects of the longitudinal crystal field of the shell sublattice (D_{sh}), and the exchange coupling constants (R_1 , and R) on the magnetic and thermodynamic properties such as the total longitudinal magnetization, the shell, and

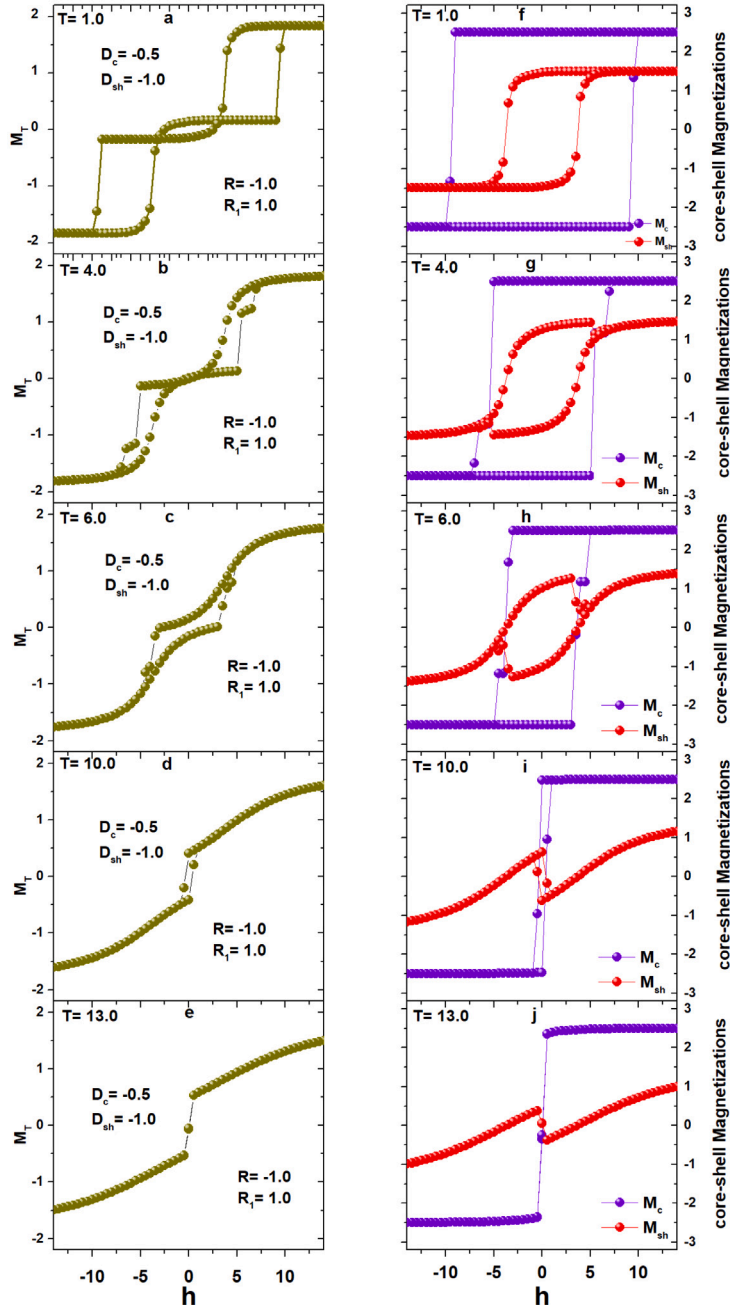


Fig. 9. The hysteresis loops for selected values of ($T = 1.0, 4.0, 8.0, 10.0, 13.0$.) when fixed values of $D_c = -0.5$, $R = -1.0$, $R_l = 1.0$, and $D_{sh} = -1.0$ (a–e) for the total system; (f–j) for core and shell sublattices.

the core magnetizations, the total susceptibility, the total specific heat, the phase diagrams variations concerning compensation and the critical temperature values, as well as the hysteresis loop behaviors of a ferrimagnetic hexagonal Ising nanotube with core-shell structure using Monte Carlo method. Our important result contains several interesting phenomena such as the second-order phase transitions, and the existence of N-, Q-, and S-type compensation behaviors according to Neel's theory of ferrimagnetism. Moreover, the system presents a triple hysteresis loops phenomenon for total magnetization, and a single loop for shell and core sublattices under certain values of D_{sh} , T , and R . Our results are consistent with previous theoretical and experimental results [41,42].

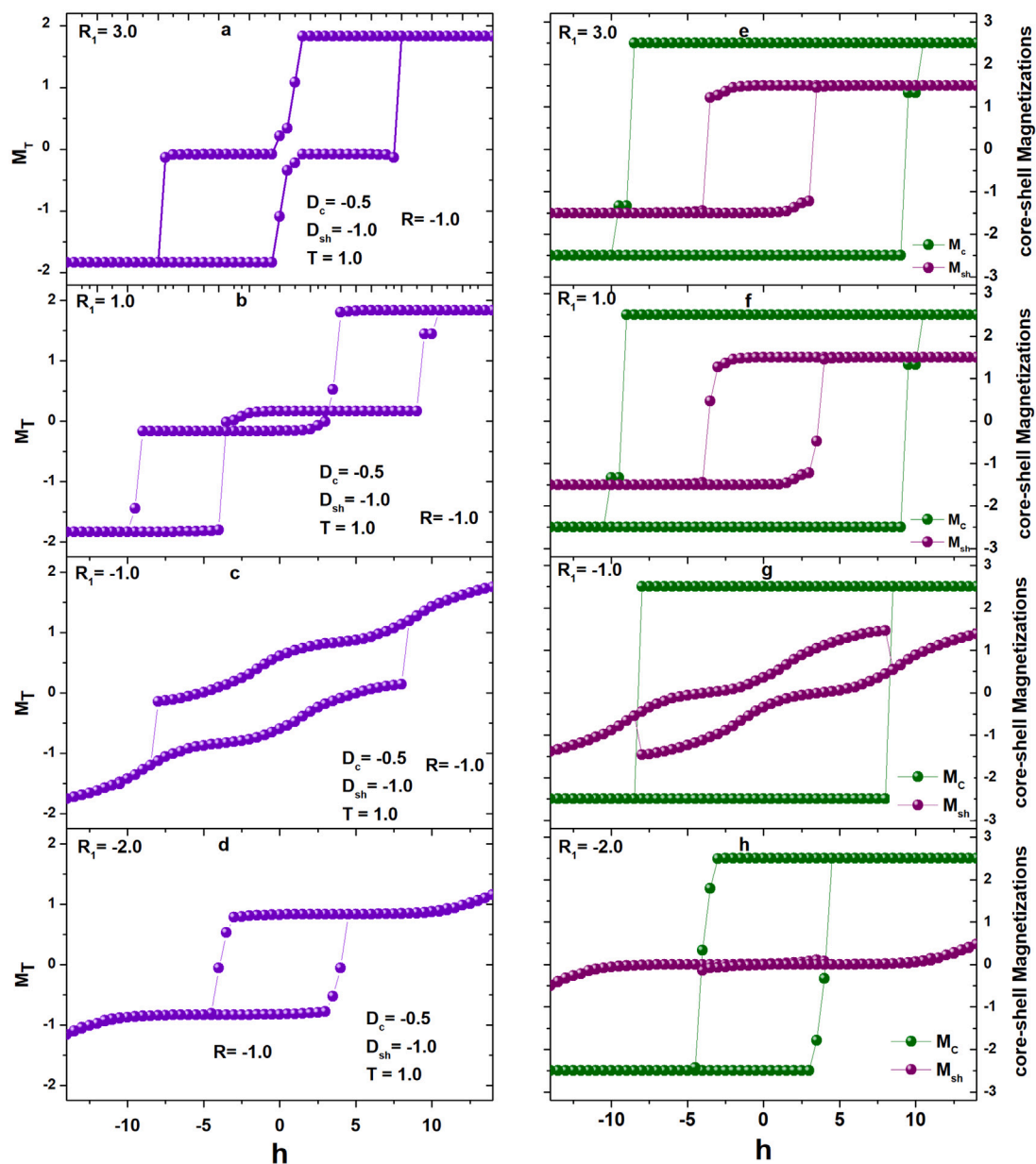


Fig. 10. The hysteresis loops for selected values of ($R_1 = 3.0, 1.0, -1.0, -2.0$.) when fixed values of $D_c = -0.5$, $R = -1.0$, and $D_{sh} = -1.0$ (a–d) for the total system; (e–h) for core and shell sublattices.

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge financial support from the Centre National for Scientific and Technical Research (CNRST)-Morocco.

References

- [1] Q. Gan, T. Wang, C. Cochrane, P. McCarron, Modulation of surface charge, particle size and morphological properties of chitosan-TPP nanoparticles intended for gene delivery, *Colloids Surfaces B* 44 (2–3) (2005) 65–73, <http://dx.doi.org/10.1016/j.colsurfb.2005.06.001>.
- [2] J. Antoniou, F. Liu, H. Majeed, J. Qi, W. Yokoyama, F. Zhong, Physicochemical and morphological properties of size-controlled chitosan-tripolyphosphate nanoparticles, *Colloids Surf. A* 465 (2015) 137–146, <http://dx.doi.org/10.1016/j.colsurfa.2014.10.040>.
- [3] L. Baia, M. Baia, W. Kiefer, J. Popp, S. Simon, Structural and morphological properties of silver nanoparticles-phosphate glass composites, *Chem. Phys.* 327 (1) (2006) 63–69, <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemphys.2006.03.036>.
- [4] M. Gross, A. Winnacker, P.J. Wellmann, Electrical, optical and morphological properties of nanoparticle indium-tin-oxide layers, *Thin Solid Films* 515 (24) (2007) 8567–8572, <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2007.03.136>.
- [5] H.W. Zhang, Y. Liu, S.H. Sun, Synthesis and assembly of magnetic nanoparticles for information and energy storage applications, *Front. Phys. Chin.* 5 (4) (2010) 347–356, <http://dx.doi.org/10.1007/s11467-010-0104-9>.
- [6] N. Tran, T.J. Webster, Magnetic nanoparticles: biomedical applications and challenges, *J. Mater. Chem.* 20 (40) (2010) 8760–8767, <http://dx.doi.org/10.1039/C0JM00994F>.
- [7] P. Saini, V. Choudhary, N. Vijayan, R.K. Kotnala, Improved electromagnetic interference shielding response of poly (aniline)-coated fabrics containing dielectric and magnetic nanoparticles, *J. Phys. Chem. C* 116 (24) (2012) 13403–13412, <http://dx.doi.org/10.1021/jp302131w>.
- [8] L. Gloag, M. Mehdipour, D. Chen, R.D. Tilley, J.J. Gooding, Advances in the application of magnetic nanoparticles for sensing, *Adv. Mater.* 31 (48) (2019) 1904385, <http://dx.doi.org/10.1002/adma.201904385>.
- [9] I. Koh, L. Josephson, Magnetic nanoparticle sensors, *Sensors* 9 (10) (2009) 8130–8145, <http://dx.doi.org/10.3390/s91008130>.
- [10] Q. Cao, X. Han, L. Li, Numerical analysis of magnetic nanoparticle transport in microfluidic systems under the influence of permanent magnets, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 45 (46) (2012) 465001, <http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/45/46/465001>.
- [11] B. Balamurugan, D.J. Sellmyer, G.C. Hadjipanayis, R. Skomski, Prospects for nanoparticle-based permanent magnets, *Scr. Mater.* 67 (6) (2012) 542–547, <http://dx.doi.org/10.1016/j.scriptamat.2012.03.034>.
- [12] B.M. De Boer, J.A.H.M. Kahlman, T.P.G.H. Jansen, H. Duric, J. Veen, An integrated and sensitive detection platform for magneto-resistive biosensors, *Biosens. Bioelectron.* 22 (9–10) (2007) 2366–2370, <http://dx.doi.org/10.1016/j.bios.2006.09.020>.
- [13] X. Dong, G. Xing, M.B. Chan-Park, W. Shi, N. Xiao, J. Wang, Q. Yan, T.C. Sum, W. Huang, P. Chen, The formation of a carbon nanotube-graphene oxide core-shell structure and its possible applications, *Carbon* 49 (15) (2011) 5071–5078, <http://dx.doi.org/10.1016/j.carbon.2011.07.025>.
- [14] Q. Xiong, C. Zheng, H. Chi, J. Zhang, Z. Ji, Reconstruction of TiO₂/MnO₂-c nanotube/nanoflake core/shell arrays as high-performance supercapacitor electrodes, *Nanotechnology* 28 (5) (2016) 055405, <http://dx.doi.org/10.1088/1361-6528/28/5/055405>.
- [15] E. Edri, S. Aloni, H. Frei, Fabrication of core-shell nanotube array for artificial photosynthesis featuring an ultrathin composite separation membrane, *ACS Nano* 12 (1) (2018) 533–541, <http://dx.doi.org/10.1021/acsnano.7b07125>.
- [16] M. Yan, Y. Yao, J. Wen, L. Long, M. Kong, G. Zhang, X. Liao, G. Yin, Z. Huang, Construction of a hierarchical NiCo₂S₄@PPy core-shell heterostructure nanotube array on Ni foam for a high-performance asymmetric supercapacitor, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 8 (37) (2016) 24525–24535, <http://dx.doi.org/10.1021/acsami.6b05618>.
- [17] Y. Zou, C. Cai, C. Xiang, P. Huang, H. Chu, Z. She, F. Xu, L. Sun, H.B. Kraatz, Simple synthesis of core-shell structure of Co-Co₃O₄@ carbon-nanotube-incorporated nitrogen-doped carbon for high-performance supercapacitor, *Electrochim. Acta* 261 (2018) 537–547, <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2017.12.184>.
- [18] W. Wang, Y. Liu, Z.Y. Gao, X.R. Zhao, Y. Yang, S. Yang, Compensation behaviors and magnetic properties in a cylindrical ferrimagnetic nanotube with core-shell structure: A Monte Carlo study, *Physica E* 101 (2018) 110–124, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2018.03.025>.
- [19] N. Maaoui, Z. adil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.Q. Benomar, Compensation behavior of an anti-ferrimagnetic core-shell nanotube like-structure: Monte Carlo study, *Solid State Commun.* 321 (2020) 114047, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2020.114047>.
- [20] T. Kaneyoshi, Compensation temperature in a cylindrical ising nanowire (or nanotube), *Physica A* 390 (21–22) (2011) 3697–3703, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2011.06.003>.
- [21] D. Lv, W. Jiang, Y. Ma, Z. Gao, F. Wang, Magnetic and thermodynamic properties of a cylindrical ferrimagnetic ising nanowire with core/shell structure, *Physica E* 106 (2019) 101–113, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2018.08.021>.
- [22] J. Zhao, X. Wang, R. Chen, L. Li, Fabrication of titanium oxide nanotube arrays by anodic oxidation, *Solid State Commun.* 134 (10) (2005) 705–710, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2005.02.028>.
- [23] C.L. Lu, K.S. Prasad, H.L. Wu, J.A.A. Ho, M.H. Huang, Au nanocube-directed fabrication of Au Pd core shell nanocrystals with tetrahedral, concave octahedral, and octahedral structures and their electrocatalytic activity, *J. Am. Chem. Soc.* 132 (41) (2010) 14546–14553, <http://dx.doi.org/10.1021/ja105401p>.
- [24] X. Duan, C.M. Lieber, General synthesis of compound semiconductor nanowires, *Adv. Mater.* 12 (4) (2000) 298–302, [http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-4095\(200002\)12:4<298::AID-ADMA298>3.0.CO;2-Y](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1521-4095(200002)12:4<298::AID-ADMA298>3.0.CO;2-Y).
- [25] M. Osada, Y. Ebina, H. Funakubo, S. Yokoyama, T. Kiguchi, K. Takada, T. Sasaki, High- dielectric nanofilms fabricated from titania nanosheets, *Adv. Mater.* 18 (8) (2006) 1023–1027, <http://dx.doi.org/10.1002/adma.200501224>.
- [26] W. Figueiredo, W. Schwarzacher, Magnetic properties of interacting nanoparticles in a triangular lattice: Monte Carlo simulations, *Phys. Rev. B* 77 (10) (2008) 104419, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.77.104419>.
- [27] W. Jiang, J.Q. Huang, Magnetic properties of a hexagonal prismatic nanoparticle with ferrimagnetic core-shell structure, *Physica E* 78 (2016) 115–122, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2015.11.021>.
- [28] L. Jiang, J. Zhang, Z. Chen, Q. Feng, Z. Huang, Monte Carlo study of magnetic properties for the mixed spin-3/2 and spin-1 ferrimagnetic nanoparticles, *Physica B* 405 (1) (2010) 420–424, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2009.08.300>.
- [29] W. Wang, Z. Peng, S.S. Lin, Q. Li, D. Lv, S. Yang, Monte Carlo simulation of magnetic properties of a ferrimagnetic nanodisk with hexagonal prismatic core-shell structure, *Superlattices Microstruct.* 113 (2018) 178–193, <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2017.10.041>.
- [30] T. Kaneyoshi, Magnetization of a nanoparticle described by the transverse Ising model, *J. Magn. Magn. Mater.* 321 (20) (2009) 3430–3435, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2009.06.064>.
- [31] N.A. Usov, S.A. Gudoshnikov, Magnetic structure of a nanoparticle in mean-field approximation, *J. Magn. Magn. Mater.* 290 (2005) 727–730, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.11.277>.
- [32] Y. Kocakaplan, E. Kantar, An effective-field theory study of hexagonal ising nanowire: Thermal and magnetic properties, *Chin. Phys. B* 23 (4) (2014) 046801, <http://dx.doi.org/10.1088/1674-1056/23/4/046801>.
- [33] E. Kantar, M. Keskin, Thermal and magnetic properties of ternary mixed ising nanoparticles with core-shell structure: Effective-field theory approach, *J. Magn. Magn. Mater.* 349 (2014) 165–172, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.08.034>.
- [34] B. Deviren, Y. Sener, Magnetic properties of mixed spin (1, 3/2) Ising nanoparticles with core-shell structure, *J. Magn. Magn. Mater.* 386 (2015) 12–19, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.03.061>.
- [35] A. Sanchot, G. Baffou, R. Marty, A. Arbouet, R. Quidant, C. Girard, E. Dujardin, *ACS Nano* 6 (4) (2012) 3434–3440, <http://dx.doi.org/10.1021/nn300470j>.

- [36] V. Yannopoulos, N.V. Vitanov, Spontaneous emission of a two-level atom placed within clusters of metallic nanoparticles, *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (9) (2007) 096210, <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/19/9/096210>.
- [37] R.C. Ge, C. Van Vlack, P. Yao, J.F. Young, S. Hughes, Accessing quantum nanoplasmonics in a hybrid quantum dot–metal nanosystem: Mollow triplet of a quantum dot near a metal nanoparticle, *Phys. Rev. B* 87 (20) (2013) 205425, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.205425>.
- [38] M. Mouhib, N. Benayad, M. Azhari, Mixed spin (1/2, 1) transverse Ising nanoparticles, *J. Magn. Magn. Mater.* 419 (2016) 325–337, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.06.022>.
- [39] J. Dong, W. Zhang, L. Liu, Electromagnetic scattering, absorption and thermal emission by clusters of randomly distributed magneto-optical nanoparticles, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 255 (2020) 107279, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2020.107279>.
- [40] P. Andreazza, V. Pierron-Bohnes, F. Tournus, C. Andreazza-Vignolle, V. Dupuis, Structure and order in cobalt/platinum-type nanoalloys: from thin films to supported clusters, *Surface Sci. Rep.* 70 (2) (2015) 188–258, <http://dx.doi.org/10.1016/j.surfrep.2015.02.002>.
- [41] H. Gao, T. Zhang, Y. Zhang, Y. Chen, B. Liu, J. Wu, X. Liu, Y. Li, M. Peng, Y. Zhang, G. Xie, F. Zhao, H.M. Fan, Ellipsoidal magnetite nanoparticles: a new member of the magnetic-vortex nanoparticles family for efficient magnetic hyperthermia, *J. Mater. Chem. B* 8 (3) (2020) 515–522, <http://dx.doi.org/10.1039/C9TB00998A>.
- [42] N. Alon, T. Havdala, H. Skaat, K. Baranes, M. Marcus, I. Levy, S. Margel, A. Sharoni, O. Shefi, Magnetic micro-device for manipulating PC12 cell migration and organization, *Lab A Chip* 15 (9) (2015) 2030–2036, <http://dx.doi.org/10.1039/C5LC00035A>.
- [43] M.K. Kim, J. Sim, J.H. Lee, M. Kim, S.K. Kim, Dynamical origin of highly efficient energy dissipation in soft magnetic nanoparticles for magnetic hyperthermia applications, *Phys. Rev. Appl.* 9 (5) (2018) 054037, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevApplied.9.054037>.
- [44] Y. Fan, Q. Zhang, Q. Xiao, X. Wang, K. Huang, High performance lithium ion battery anodes based on carbon nanotube–silicon core–shell nanowires with controlled morphology, *Carbon* 59 (2013) 264–269, <http://dx.doi.org/10.1016/j.carbon.2013.03.017>.
- [45] P.X. Gao, C.S. Lao, Y. Ding, Z.L. Wang, Metal/semiconductor core/shell nanodisks and nanotubes, *Adv. Funct. Mater.* 16 (1) (2006) 53–62, <http://dx.doi.org/10.1002/adfm.200500301>.
- [46] M. Mullner, T. Lunkenbein, J. Breu, F. Caruso, A.H. Muller, Template-directed synthesis of silica nanowires and nanotubes from cylindrical core–shell polymer brushes, *Chem. Mater.* 24 (10) (2012) 1802–1810, <http://dx.doi.org/10.1021/cm300312g>.
- [47] H. Xia, Y. Wan, G. Yuan, Y. Fu, X. Wang, Fe₃O₄/carbon core–shell nanotubes as promising anode materials for lithium-ion batteries, *J. Power Sources* 241 (2013) 486–493, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.04.126>.
- [48] Y. Chen, C. Zhu, T. Wang, The enhanced ethanol sensing properties of multi-walled carbon nanotubes/SnO₂ core/shell nanostructures, *Nanotechnology* 17 (12) (2006) 3012–3017, <http://dx.doi.org/10.1088/0957-4484/17/12/033>.
- [49] X.Y. Kong, Y. Ding, Z.L. Wang, The enhanced ethanol sensing properties of multi-walled carbon nanotubes/SnO₂ core/shell nanostructures, *J. Phys. Chem. B* 108 (2) (2004) 570–574, <http://dx.doi.org/10.1088/0957-4484/17/12/033>.
- [50] J.Y. Chen, N. Ahmad, D.W. Shi, W.P. Zhou, X.F. Han, Synthesis and magnetic characterization of Co–NiO–Ni core–shell nanotube arrays, *J. Appl. Phys.* 110 (7) (2011) 073912, <http://dx.doi.org/10.1063/1.3646491>.
- [51] U. Khan, W.J. Li, N. Adeela, M. Irfan, K. Javed, C.H. Wan, S. Riaz, X.F. Han, Magnetic response of hybrid ferromagnetic and antiferromagnetic core–shell nanostructures, *Nanoscale* 8 (11) (2016) 6064–6070, <http://dx.doi.org/10.1039/D2NR01643E>.
- [52] M. Keskin, Ertas M., Dynamic magnetic properties of a hexagonal Ising nanowire system with higher-spin, dynamic magnetic, *Phase Transit.* 93 (4) (2020) 361–375, <http://dx.doi.org/10.1080/01411594.2020.1732976>.
- [53] Y. Kocakaplan, Ertas M., Magnetic properties of the spin-3/2 Blume–Capel model on a hexagonal Ising nanowire, *J. Exp. Theor. Phys.* 121 (4) (2015) 606–615, <http://dx.doi.org/10.1134/S1063776115100118>.
- [54] Ertas M., E. Kantar, Cylindrical Ising nanowire with crystal field: existence of a dynamic compensation temperatures, *Phase Transit.* 88 (6) (2015) 567–581, <http://dx.doi.org/10.1080/01411594.2014.1002783>.
- [55] E. Kantar, Ertas M., Influence of frequency on the kinetic spin-3/2 cylindrical Ising nanowire system in an oscillating field, *J. Supercond. Nov. Magn.* 28 (8) (2015) 2529–2538, <http://dx.doi.org/10.1007/s10948-015-3072-z>.
- [56] Ü. Temizer, E. Kantar, An investigation of competition on the dynamic magnetic properties of the core/shell nanowire, *Chinese J. Phys.* 57 (2019) 269–281, <http://dx.doi.org/10.1016/j.cjph.2018.11.010>.
- [57] Ertas M., Dynamical thermal dependences of the total magnetization and dynamic magnetic hysteresis properties of Ising bilayer system with square lattice, *Physica B* 550 (2018) 154–162, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2018.08.053>.
- [58] W. Wang, Y. Liu, Z.Y. Gao, X.R. Zhao, Y. Yang, S. Yang, Compensation behaviors and magnetic properties in a cylindrical ferrimagnetic nanotube with core–shell structure: A Monte Carlo study, *Physica E* 101 (2018) 110–124, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2018.03.025>.
- [59] F. Taskin, O. Cankö, A. Erdinc, A.F. Yildirim, Thermal and magnetic properties of a nanotube with spin-1/2 core and spin-3/2 shell structure, *Physica A* 407 (2014) 287–294, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2014.03.020>.
- [60] R.M. Francisco, J.P. Santos, Magnetic properties of the Ashkin–Teller model on a hexagonal nanotube, *Phys. Lett. A* 383 (11) (2019) 1092–1098, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2019.01.001>.
- [61] Y. Liu, W. Wang, D. Lv, X.R. Zhao, T. Huang, Z.Y. Wang, Hysteresis behaviors in a ferrimagnetic Ising nanotube with hexagonal core–shell structure, *Physica B* 541 (2018) 79–88, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2018.04.042>.
- [62] R. Masrour, A. Jabbar, Monte Carlo study of magnetic and thermodynamic properties of a ferrimagnetic mixed-spin Ising nanotube with double (surface and core) walls, *Europhys. Lett.* 128 (4) (2020) 46002, <http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/128/46002>.
- [63] K. Htoutou, B. Nmaila, M. Madani, L.B. Drissi, R. Ahlaamara, Monte Carlo study of thermodynamic and hysteresis properties of mixed spin-(1, 1/2) ferrimagnetic nanowire with alternate layers, *Mater. Res. Express* 4 (11) (2017) 116108, <http://dx.doi.org/10.1088/2053-1591/aa98f3>.
- [64] B. Nmaila, K. Htoutou, L.B. Drissi, R. Ahlaamara, The magnetic properties and hysteresis loops of mixed spin-(3/2, 2) hexagonal Ising nanowire system with alternate layers, *Solid State Commun.* 336 (2021) 114418, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114418>.
- [65] B. Nmaila, K. Htoutou, R. Ahlaamara, L.B. Drissi, Thermodynamic and magnetic properties of a mixed spins (3/2, 5/2) Ising nanowire with hexagonal structure: Monte Carlo simulation, *Indian J. Phys.* (2022) 1–10, <http://dx.doi.org/10.1007/s12648-022-02393-1>.
- [66] P. Mathé, E. Novak, Simple Monte Carlo and the metropolis algorithm, *J. Complexity* 23 (4–6) (2007) 673–696, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jco.2007.05.002>.
- [67] N. Si, Y.Y. Guan, W.C. Gao, A.B. Guo, Y.L. Zhang, W. Jiang, Ferrimagnetism and reentrant behavior in a coronene-like superlattice with double-layer, *Physica A* 589 (2022) 126671, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2021.126671>.
- [68] W. Jiang, X.X. Li, L.M. Liu, J.N. Chen, F. Zhang, Hysteresis loop of a cubic nanowire in the presence of the crystal field and the transverse field, *J. Magn. Magn. Mater.* 353 (2014) 90–98, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2013.10.028>.
- [69] M. El Hamri, S. Bouhou, I. Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja, A theoretical study of the hysteresis behaviors of a transverse spin-1/2 Ising nanocube, *J. Magn. Magn. Mater.* 413 (2016) 30–38, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.04.021>.
- [70] Y. Benhouria, I. Bouziani, I. Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja, Quantum Monte Carlo study of dynamic magnetic properties of nano-graphene, *J. Magn. Magn. Mater.* 460 (2018) 223–228, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.04.007>.
- [71] W. Jiang, V.C. Lo, B.D. Bai, J. Yang, Magnetic hysteresis loops in molecular-based magnetic materials AFelFeIII (C2o4) 3, *Physica A* 389 (11) (2010) 2227–2233, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2010.01.050>.

Résumé

Les nanofils et les nanotubes magnétiques ont été largement étudiés pour leurs applications variées, allant du stockage de l'information aux biomédicales. Cette multitude de fonctionnalités de telles nanostructures magnétiques sont dues à leurs tailles nanométriques, qui génèrent des phénomènes atypiques. Dans cette logique, plusieurs travaux théoriques et expérimentaux ont été consacrés à l'exploration des propriétés magnétiques de ce type de nanomatériaux.

Le but de cette thèse est d'étudier les propriétés magnétiques et thermodynamiques des nanofils et nanotubes à spins mixtes et à structure hexagonale, en utilisant la simulation numérique de Monte-Carlo basée sur l'algorithme de Métropolis. Pour atteindre nos objectifs, nous avons mis un plan pratique composé de deux volets : l'un théorique et conceptuel et le deuxième a un aspect pratique. Dans le premier volet, nous avons présenté en bref des généralités sur le magnétisme, la morphologie des nanomatériaux et leurs propriétés magnétiques et hystérétiques, les différents modèles de spins ainsi que les méthodes théoriques et numériques utilisées dans notre champ de recherche. Le deuxième volet est consacré à nos différentes contributions réalisées. Il s'agit d'étudier en premier lieu les propriétés magnétiques des nanofils à spins mixtes et à deux couches alternées, en deuxième lieu, d'examiner les propriétés thermiques et magnétiques des nanotubes à spins mixtes de type cœur-coquille (core-shell). Pour ce faire, nous avons examiné en détail les effets de l'anisotropie cristalline, des interactions d'échange intra et intercouches, du champ magnétique externe longitudinal et de la température sur l'aimantation totale, les aimantations partielles, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique, l'énergie interne, les cycles d'hystérésis, les transitions de phases, ainsi que sur le phénomène de compensation. Nos résultats obtenus sont en bon accord avec d'autres travaux publiés d'ordres théorique et expérimental. Enfin, nous avons terminé notre thèse par une conclusion générale et une mise en perspective des travaux à effectuer à long terme.

Mots-clefs : Propriétés magnétiques et thermodynamiques, Nanostructures, Nanofils, Nanotubes, Modèle d'Ising à spins mixtes, Structure hexagonale, Couches alternées, Cœur-coquille, Simulation Monte Carlo, Température de compensation, Cycles d'hystérésis, Diagramme de phase.

Abstract

Magnetic nanowires and nanotubes have been widely studied for their various applications, ranging from information storage to biomedical. This multitude of functionalities of such magnetic nanostructures are due to their nanometric sizes, which generate atypical phenomena. In this logic, several theoretical and experimental works have been devoted to the exploration of the magnetic properties of this type of nanomaterials. The aim of this thesis is to study the magnetic and thermodynamic properties of mixed-spin nanowires and nanotubes with hexagonal structure, using Monte-Carlo numerical simulation based on the Metropolis algorithm. In order to achieve our objectives, we put a practical plan composed of two parts: one theoretical and conceptual and the second has a practical aspect. In the first part, we presented in brief generalities on magnetism, the morphology of nanomaterials and their magnetic and hysteretic properties, the different spin models as well as the theoretical and numerical methods used in our research field. The second part is devoted to our various contributions. First, the magnetic properties of mixed-spin and alternating bilayer nanowires are studied. Second, the thermal and magnetic properties of mixed-spin core-shell nanotubes are examined. To this end, we have examined in detail the effects of crystalline anisotropy, intra- and inter-layer exchange interactions, external longitudinal magnetic field and temperature on the total magnetization, partial magnetization, susceptibility, specific heat, internal energy, hysteresis cycles, phase transitions, as well as on the compensation phenomenon. Our results are in good agreement with other published theoretical and experimental works. Finally, we ended our thesis with a general conclusion and a perspective of the work to be done in the long term.

Keyword: Magnetic and thermodynamic properties, Nanostructures, Nanowires, Nanotubes, Mixed spin Ising model, hexagonal structure, Alternating layers, Core-shell, Monte Carlo simulation, Compensation temperature, Hysteresis loops, Phase diagram.

Résumé

Les nanofils et les nanotubes magnétiques ont été largement étudiés pour leurs applications variées, allant du stockage de l'information aux biomédicales. Cette multitude de fonctionnalités de telles nanostructures magnétiques sont dues à leurs tailles nanométriques, qui génèrent des phénomènes atypiques. Dans cette logique, plusieurs travaux théoriques et expérimentaux ont été consacrés à l'exploration des propriétés magnétiques de ce type de nanomatériaux.

Le but de cette thèse est d'étudier les propriétés magnétiques et thermodynamiques des nanofils et nanotubes à spins mixtes et à structure hexagonale, en utilisant la simulation numérique de Monte-Carlo basée sur l'algorithme de Métropolis. Pour atteindre nos objectifs, nous avons mis un plan pratique composé de deux volets : l'un théorique et conceptuel et le deuxième a un aspect pratique. Dans le premier volet, nous avons présenté en bref des généralités sur le magnétisme, la morphologie des nanomatériaux et leurs propriétés magnétiques et hystérétiques, les différents modèles de spins ainsi que les méthodes théoriques et numériques utilisées dans notre champ de recherche. Le deuxième volet est consacré à nos différentes contributions réalisées. Il s'agit d'étudier en premier lieu les propriétés magnétiques des nanofils à spins mixtes et à deux couches alternées, en deuxième lieu, d'examiner les propriétés thermiques et magnétiques des nanotubes à spins mixtes de type cœur-coquille (core-shell). Pour ce faire, nous avons examiné en détail les effets de l'anisotropie cristalline, des interactions d'échange intra et intercouches, du champ magnétique externe longitudinal et de la température sur l'aimantation totale, les aimantations partielles, la susceptibilité totale, la chaleur spécifique, l'énergie interne, les cycles d'hystérésis, les transitions de phases, ainsi que sur le phénomène de compensation. Nos résultats obtenus sont en bon accord avec d'autres travaux publiés d'ordres théorique et expérimental. Enfin, nous avons terminé notre thèse par une conclusion générale et une mise en perspective des travaux à effectuer à long terme.

Mots-clefs : Propriétés magnétiques et thermodynamiques, Nanostructures, Nanofils, Nanotubes, Modèle d'Ising à spins mixtes, Structure hexagonale, Couches alternées, Cœur-coquille, Simulation Monte Carlo, Température de compensation, Cycles d'hystérésis, Diagramme de phase.

Abstract

Magnetic nanowires and nanotubes have been widely studied for their various applications, ranging from information storage to biomedical. This multitude of functionalities of such magnetic nanostructures are due to their nanometric sizes, which generate atypical phenomena. In this logic, several theoretical and experimental works have been devoted to the exploration of the magnetic properties of this type of nanomaterials. The aim of this thesis is to study the magnetic and thermodynamic properties of mixed-spin nanowires and nanotubes with hexagonal structure, using Monte-Carlo numerical simulation based on the Metropolis algorithm. In order to achieve our objectives, we put a practical plan composed of two parts: one theoretical and conceptual and the second has a practical aspect. In the first part, we presented in brief generalities on magnetism, the morphology of nanomaterials and their magnetic and hysteretic properties, the different spin models as well as the theoretical and numerical methods used in our research field. The second part is devoted to our various contributions. First, the magnetic properties of mixed-spin and alternating bilayer nanowires are studied. Second, the thermal and magnetic properties of mixed-spin core-shell nanotubes are examined. To this end, we have examined in detail the effects of crystalline anisotropy, intra- and inter-layer exchange interactions, external longitudinal magnetic field and temperature on the total magnetization, partial magnetization, susceptibility, specific heat, internal energy, hysteresis cycles, phase transitions, as well as on the compensation phenomenon. Our results are in good agreement with other published theoretical and experimental works. Finally, we ended our thesis with a general conclusion and a perspective of the work to be done in the long term.

Keyword: Magnetic and thermodynamic properties, Nanostructures, Nanowires, Nanotubes, Mixed spin Ising model, hexagonal structure, Alternating layers, Core-shell, Monte Carlo simulation, Compensation temperature, Hysteresis loops, Phase diagram.