

THESE

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

Structure de Recherche : Laboratoire de la Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires, Modélisations et Simulations (LaMCScI)

Discipline : Physique

Spécialité : Physique Informatique

Présentée et soutenue le : 20/10/2018 par :

Saloua AOUINI

L'étude des propriétés magnétiques des nanostructures à l'aide des simulations de Monte Carlo

JURY

<i>Abdelaziz MHIRECH</i>	<i>Professeur, Faculté des Sciences, Rabat</i>	<i>Président</i>
<i>Abdelmajid AINANE</i>	<i>Professeur, Faculté des Sciences, Meknès</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Abdelilah BENYOUSSEF</i>	<i>Professeur, Faculté des Sciences, Rabat</i>	<i>Examineur</i>
<i>Hamid EZ-ZAHRAOUY</i>	<i>Professeur, Faculté des Sciences, Rabat</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Lahoucine BAHMAD</i>	<i>Professeur, Faculté des Sciences, Rabat</i>	<i>Directeur de Thèse</i>
<i>Soumia ZITI</i>	<i>Professeur Habilité, Faculté des Sciences, Rabat</i>	<i>Co-Directeur de Thèse</i>

Année Universitaire : 2018/2019

Remerciements

Les travaux présentés dans ce mémoire de thèse ont été réalisés au sein du Laboratoire de la Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires, Modélisations et Simulations (LaMCScI) du département de physique de la Faculté des Sciences de Rabat.

J'adresse également mes sincères remerciements à Monsieur MHIRECH Abdelaziz, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences, Rabat, pour avoir accepté de présider mon jury de thèse. Aussi pour l'ensemble des travaux dont il a été collaborateur, ainsi que pour les questions pertinentes qu'il a proposé.

J'adresse également mes sincères remerciements à Monsieur AINANE Abdelmajid, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences, Meknès, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de se déplacer pour être parmi les membres du jury et d'apporter ses vives contributions à l'enrichissement de ce travail. Veuillez agréer, Monsieur, l'assurance de mon profond respect.

Je tiens tout d'abord à remercier vivement mon superviseur de thèse Monsieur BAHMAD Lahoucine, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences, Rabat, qui m'a mis sur la voie de ce sujet scientifique très intéressant, pour m'avoir fait confiance tout au long de mon doctorat, pour son fort engagement, pour ses conseils très avisés et son bien entendu, et pour nos échanges scientifiques fructueux.

L'ensemble de mon travail s'est nourri de nombreux échanges scientifiques, qui ont été rendus possibles, par l'aide technique que j'ai reçue de la part de Madame ZITI Soumia, Professeur Habilité à la Faculté des Sciences, Rabat. Je voudrais donc lui adresser ici mes sincères remerciements. Je lui suis très reconnaissante car sans sa disponibilité et son fantastique encadrement, une partie de ce travail de thèse n'aurait certainement pas eu la même saveur.

Un grand merci à Monsieur BENYOUSSEF Abdelilah, membre résidant, de l'Académie Hassan II des Sciences et Technique de Rabat, pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse. Je tiens à remercier Monsieur EZ-ZAHRAOUY Hamid, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences, Rabat. Malgré ses différentes tâches en

tant que Chef du département de Physique et Directeur du laboratoire de la Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires, Modélisations et Simulations (LaMCScI), je lui suis très reconnaissante pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je tiens également à remercier Monsieur LABRIM Hicham, Docteur Chercheur au centre CNESTEN de Rabat, pour sa collaboration étroite et fructueuse.

Je remercie énormément tout les membres de jury pour leur disponibilité le jour de ma soutenance, pour le privilège qu'ils m'ont accordé par leur présence et pour l'intérêt qu'ils ont apporté à mon mémoire de Thèse. Je tiens à vous remercier encore une fois pour avoir accepté de partager avec moi l'un des moments les plus mémorables de toute ma vie. Ces moments qui risquent de créer un événement inoubliable pour le reste de mes jours.

Je tiens à remercier tout particulièrement mes meilleur(e)s ami(e)s pour leurs encouragements, leurs discussions scientifiques, ainsi que pour les bons moments partagés lors de nos études.

Je remercie également toutes les personnes qui ont pu être impliquées de près ou de loin dans cette thèse. La liste est longue et je suis certaine d'oublier quelqu'un en la dressant. Je vais donc m'abstenir, mais sachez que chacun d'entre vous m'a permis à sa façon de mener à bien cette aventure.

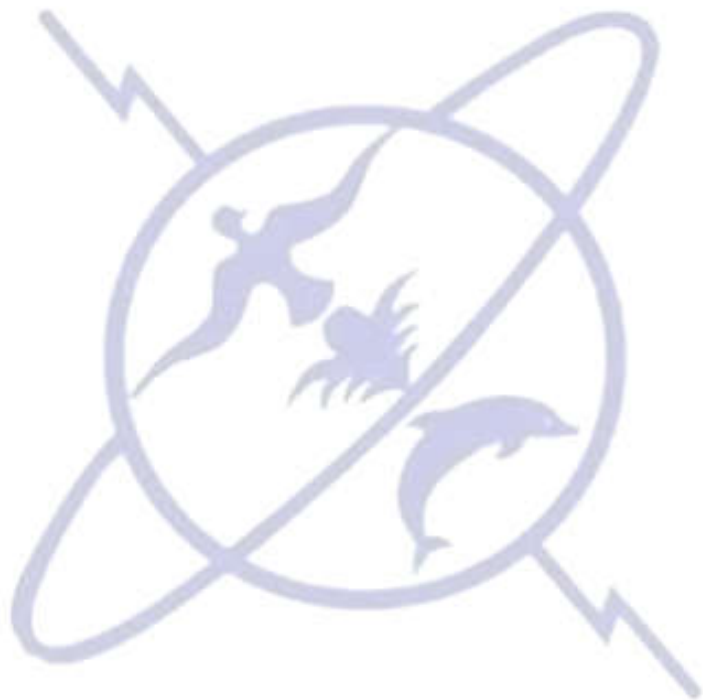
D'un côté plus personnel, mes premiers remerciements vont à mes parents, Rkia et Jamal. Ils m'ont toujours accompagné et encouragé dans tout ce que j'ai entrepris tout en sachant me dire non et me recadrer lorsque cela était nécessaire. Ils m'ont soutenu pendant toute ma scolarité et m'ont permis de le faire dans les meilleures conditions. Je leur suis reconnaissante de leur éducation, de leur support et de tout l'amour qu'ils m'ont donné.

Je terminerai par remercier infiniment mes chers frères Mohammed et Ayoub, qui ont le plus subi mes sautes d'humeur, mes absences, mes périodes de stress. Merci ma petite famille pour votre soutien pendant ce travail de thèse.

A ceux partis trop tôt...

A ma mère qui rythme ma vie...

Je vous dédie ce travail avec plein d'amour...



Résumé

Motivé par le domaine des nanotechnologies et l'importance des nanostructures, ce mémoire de thèse est une modeste contribution à l'étude des propriétés magnétiques de ces composés, à l'aide de la méthode de Monte Carlo. Ce travail débute par une introduction sur quelques modèles bidimensionnels, ensuite il décrit les principes et les notions de base de la simulation Monte Carlo. Nous utilisons l'algorithme de Metropolis avec les conditions aux bords cycliques. Nous avons également étudié les propriétés magnétiques décrivant les phénomènes critiques, particulièrement les transitions de phase, le mouillage magnétique et l'ordre-désordre. Cette thèse présente des résultats de différents travaux de recherche bien détaillés en étudiant les propriétés magnétiques, la température de compensation et les cycles d'hystérésis de certaines nanostructures. Finalement, nous terminons par une conclusion générale et des perspectives.

Mots-clefs :

La méthode de Monte Carlo; Les nanostructures; Le mouillage magnétique; L'ordre-désordre; Les propriétés magnétiques; Cycles d'hystérésis.

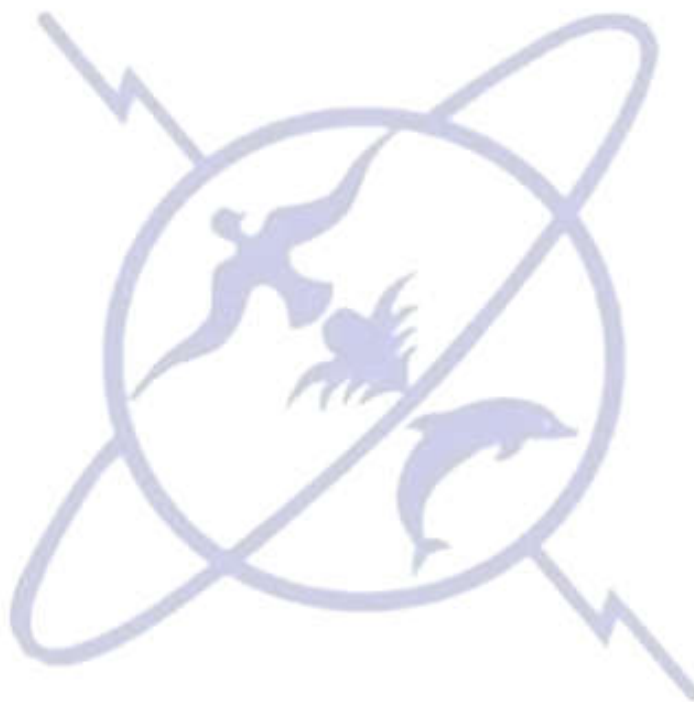
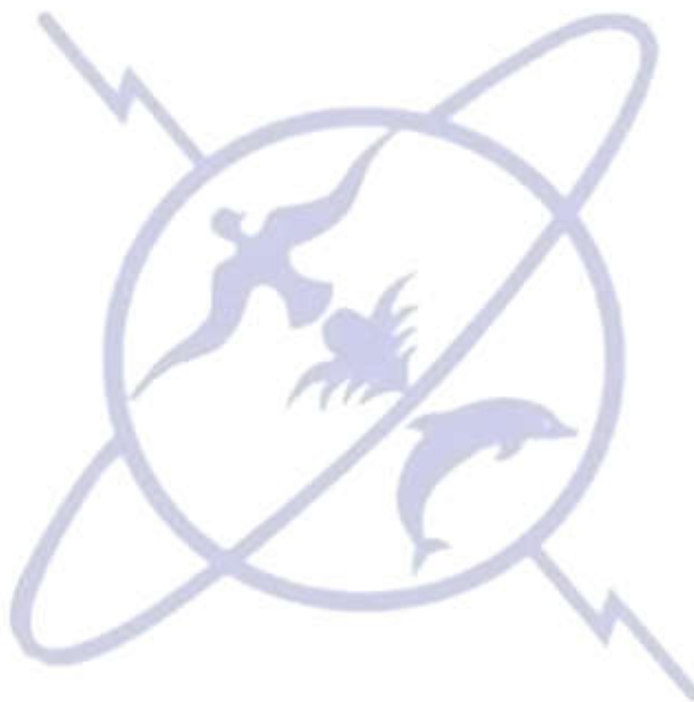


Table des matières

Introduction générale.....	9
Chapitre 1 Simulations de Monte Carlo et théorie des graphes	19
1.1 Les différents modèles de spin	19
1.1.1 Modèle d'Ising	19
1.1.2 Modèle XY	19
1.1.3 Modèle d'Heisenberg.....	20
1.2 Algorithmes de la simulation Monte Carlo	20
1.2.1 Monte Carlo numérique	22
1.2.2 Algorithme de Metropolis.....	23
1.2.3 Algorithme de BKL (Bortz, Kalos, Lebowitz)	26
1.3 Conditions aux bords	27
1.3.1 Conditions aux limites périodiques.....	27
1.3.2 Conditions aux limites périodiques vis	27
1.3.3 Conditions aux limites anti-périodiques	28
1.3.4 Conditions aux limites de bord libre.....	28
1.4 Les techniques statiques	28
1.4.1 Formulation du modèle de calcul.....	28
1.4.2 Principes de la simulation Monte Carlo.....	29
1.4.3 Temps d'équilibre	31
1.4.4 Mesures	31
1.5 La théorie des graphes	32

1.5.1 Typologies des graphes	33
1.5.2 Graphes et algèbre linéaire	34
Chapitre 2 Etude des phénomènes critiques.....	37
2.1 Phénomènes critiques	37
2.1.1 Transition de phase	38
2.1.2 Classification des transitions de phase.....	38
2.1.3 Phénomène du mouillage magnétique	39
2.1.4 Phénomène de l'ordre et le désordre.....	40
2.2 Propriétés magnétiques	41
2.2.1 Température de Curie	42
2.2.2 Coercivité.....	42
2.2.3 Anisotropie magnétique.....	42
2.3 Propriétés hystérétiques	42
2.3.1 Domaines magnétiques	43
2.3.2 Cycles d'hystérésis	43
2.3.3 Paramètre caractéristiques des cycles d'hystérésis	44
2.3.4 Matériaux magnétiques durs et doux	45
Chapitre 3 : Etude des propriétés magnétiques des nanomatériaux Core/Shell:.....	49
3.1 Le phénomène de compensation dans un nano-carré à une structure core/shell	50
3.2 Mouillage et les transitions de couches dans une structure nano-coques.....	55
3.3 Mouillage et les transitions de couches dans une structure nano-hexagonale	60
3.4 Propriétés magnétiques dans une nanostructure polymère core/shell	66
Chapitre 4 : Etude des phénomènes critiques des Dendrimères:	74

4.1 Mouillage et les transitions de couches dans une nanostructure de dendrimère de polyamidoamine (PAMAM).....	74
4.2 Etude des transitions de couches ordre-désordre dans une nanostructure (PAMAM) ..	79
4.3 Transitions de couches magnétiques dans une nanostructure de dendrimère de polyamidoamine (PAMAM).....	84
Chapitre 5 : Etude du comportement critique des Fullerènes:	90
5.1 Propriétés magnétiques des fullerènes: X_{20} , X_{60} , X_{70}	90
5.2 Le phénomène de compensation dans une structure double fullerène	94
5.3 Etude d'un système de spins mixtes dans une structure fullerène de type: $X_{30}Y_{30}$	101
Conclusion générale et perspectives.....	108
Bibliographie	111



Introduction générale

Si les origines du magnétisme sont restées longtemps mystérieuses, elles sont bien mieux appréhendées aujourd'hui. Du point de vue historique, on a d'abord constaté l'existence des forces magnétiques avec les aimants. Les propriétés attractives ou répulsives des aimants, appelés autrefois pierre d'aimant, sont connues depuis des siècles. Puis avec l'apparition de l'électricité, un lien entre le courant électrique et le champ magnétique est observé: des électrons en mouvement peuvent générer un champ magnétique. Avec la mise au point d'une dynamo, on montre qu'une induction variable crée un champ électrique. On montre aussi que les champs électromagnétiques sont capables de se propager dans l'espace. C'est le début du télégraphe sans fil. Finalement, avec le développement de la physique atomique, la recherche s'oriente vers l'infiniment petit. Aujourd'hui, le magnétisme évoque une des forces d'attraction les plus importantes à l'échelle humaine, loin des forces de gravitation.

La nanotechnologie est une nouvelle approche liée à la compréhension et à la maîtrise des propriétés de la matière à l'échelle nanométrique, un nanomètre (un milliardième de mètre) correspond à la longueur d'une petite molécule.

Un nanomatériau est un matériau (sous forme de poudre, aérosol ou quasi-gaz, suspension liquide, gel) possédant des propriétés particulières à cause de sa taille et structure nanométrique. Les nanomatériaux sont habituellement issus de la nanotechnologie, à la différence des nanoparticules qui peuvent être d'origine naturelle ou résulter de processus tels que le soudage, le fumage, le polissage. On entend par nanomatériau un matériau naturel, formé accidentellement ou manufacturé contenant des particules libres, sous forme d'agrégat ou sous forme d'agglomérat, dont au moins 50 % des particules, dans la répartition numérique par taille, présentent une ou plusieurs dimensions externes se situant entre 1 et 100 nm ».

De nombreux matériaux font l'objet de recherches visant à les produire sous forme de nanoparticules (métaux, céramiques, matériaux diélectriques, oxydes magnétiques, polymères divers, carbones, etc.), seuls ou en formes ou structures composites. On parle également de

nano-composites (et nano-composite de polymère) qui sont par exemple des matériaux dits « nanostructures » (en surface ou en volume), ou « nano-renforcés ». Avec la mise au point de techniques permettant d'élaborer des matériaux dont les dimensions sont nanométriques, un champ considérable s'est ouvert pour des matériaux nouveaux et des propriétés ont été découvertes qui relèvent de la physique (optique, électronique, magnétisme), avec déjà un ensemble très important d'applications industrielles, de la catalyse ou de la mécanique, avec toutefois, pour les matériaux structuraux, une limitation liée à la difficulté à accéder à des quantités de matière ou à des coûts pertinents. Parallèlement se sont développées des technologies permettant de façonner, par modulation de la composition ou par usinage à l'échelle nanométrique, des systèmes de matériaux et, de là, d'inventer des dispositifs nouveaux en microélectronique et en informatique.

À ce niveau, la matière présente des propriétés différentes et souvent étonnantes, et les frontières entre les disciplines scientifiques et techniques établies s'estompent. La nanotechnologie est un champ interdisciplinaire qui rassemble les recherches fondamentales et appliquées à la frontière entre la physique, la chimie, l'ingénierie et les sciences de la vie [1-9]. La nanotechnologie est souvent décrite comme potentiellement «perturbatrice» ou «révolutionnaire» en termes d'impact possible sur les méthodes de production industrielle. Elle apporte des solutions possibles à toute une série de problèmes actuels par le biais des matériaux, composants et systèmes plus petits, plus légers, plus rapides et plus efficaces. Ces possibilités ouvrent de nouvelles perspectives pour la création de la richesse et de l'emploi. La nanotechnologie devrait également apporter une contribution essentielle à la résolution des problèmes mondiaux et environnementaux en réalisant des produits et des processus destinés à un usage plus spécifique, en économisant des ressources et en réduisant le volume des déchets et des émissions. La nanotechnologie a aussi le potentiel pour révolutionner la façon dont les matériaux et les produits sont créés naturellement et des fonctionnalités qui peuvent être accessibles. Elle a déjà un impact commercial significatif, ce qui croîtra certainement durant les années à venir.

Le développement des nanotechnologies a été découvert par R.P. Feynman dès 1959 [10] lors de sa célèbre communication intitulée (“Il y a plein de place en bas”), au cours de laquelle il a évoqué la possibilité de manipuler la matière à l’échelle de l’atome, dont la structuration de la matière à l’échelle nanométrique ouvre évidemment des perspectives, du fait de l’apparition de nombreuses propriétés que ne possèdent pas les objets de plus grande taille. Il a fallu attendre les années 1980 pour que les progrès de la microscopie électronique (microscope à effet tunnel, à force atomique, etc.) rendent possible l’observation de la matière au niveau atomique. Cette observation au cœur de la matière a permis de révéler une quantité de nouvelles propriétés propres à cette échelle. Autrement dit, de nombreuses propriétés (optiques, magnétiques, mécaniques, etc...) dépendent directement de la taille de la matière. Les propriétés intrinsèques des nanomatériaux donnent lieu à des innovations dans de nombreux domaines industriels (médecine, énergie, environnement, transports, textile, santé, chimie, électronique et optique), même de nombreuses propriétés physiques (optiques, catalytiques, mécaniques, magnétiques, thermiques, de conductivité, etc.) que ne possèdent pas les objets de plus grande taille. L’étude des propriétés magnétiques des nanomatériaux est le domaine de la physique qui a donné naissance aux nombreux phénomènes magnétiques de la nanotechnologie. La science et la nanotechnologie des nanostructures est une région vaste et interdisciplinaire de la recherche et du développement. Cette innovation est devenue explosive à l’échelle mondiale dans ces dernières années pour garantir ces progrès dans le futur.

Récemment, le domaine de la nanotechnologie est très développé par l’étude des propriétés magnétiques, dont les nanoparticules magnétiques [11] sont des éléments très intéressent pour le développement de la nanotechnologie. Parmi ces nanostructures on trouve les nanoparticules [12] et l’oxyde de fer Fe_3O_4 [13] appliqués en biologie, et en médecine [14, 15], l’hélium 4He [16, 17] et l’éthylène [18–20] insérés en graphite. Ainsi les nano-films [21,22], les nano-fils (wires) [23-27] et les nano-tubes [28,29] sont intensivement étudiés. Ces nanomatériaux ont attiré une attention spéciale grâce à leurs technologies potentielles et leurs applications industrielles par l’émergence des nanostructures. Un immense effort a été fourni pour une compréhension profonde du comportement magnétique des nanomatériaux dans le

but de maîtriser plusieurs domaines tels que; les applications médicales [30,31], le stockage des informations [32] et les aimants permanents [33] qui sont des sujets d'études récentes.

Parmi ces nanomatériaux, on trouve les dendrimères, qui se caractérisent par une architecture commune dans les systèmes biologiques, les arbres, les vaisseaux sanguins, les neurones, et d'autres structures biologiques. Bien que ces structures se présentent sous plusieurs formes dans la nature, l'échelle moléculaire de ces nano-structures dendritiques n'est pas bien définie. Les dendrimères sont complètement des nouvelles classes de polymères synthétiques [34] y compris l'architecture dendritique à l'échelle moléculaire. La première synthèse des dendrimères [35,36] a été établie en 1985 par Vögtle et ses collaborateurs [37,38]. Le terme : « dendrimer » a son origine du mot Grecque « dendrimos » [39] signifiant « arbre ». Habituellement, le polymère synthétique traditionnel est composé par une mixture qui contient beaucoup de molécules avec différentes masses. Les dendrimères ont une forme unique telle que les polymères contrairement aux polymères synthétiques traditionnels [40,41], dont les dendrimères sont aussi uniques parmi les polymères grâce à leurs branches répétitives et régulières. La structure particulière des dendrimères a fait l'objet de plusieurs recherches dans plusieurs domaines scientifiques. La structure des dendrimères est constituée par: un cœur, des branches, et une large surface vide [42-44]. Ces macromolécules sont régulièrement décrites par leurs numéros de générations, par exemple : 0th (G0), 1th (G1), 2th (G2) ainsi de suite. En général le cœur de la dendrimer peut contenir plusieurs branches [45] mais les dendrimères typiques contiennent entre deux et quatre branches en cœur. Les polyamidoamines (PAMAM) est un type particulier des dendrimères dont le cœur est formé par l'Ethylendiamine (EDA) [46-51]. Ce cœur contient quatre branches pour construire la première génération 0th (G0) d'une dendrimer [52]. Les branches des dendrimères PAMAM ont plus d'influence sur les propriétés structurelles des dendrimères.

Récemment, diverses recherches ont focalisé sur l'étude des propriétés magnétiques des nanomatériaux [53-60]. En effet, cet intérêt est dû au fait que les matériaux et les nanomatériaux magnétiques ont une impotence extrême dans les technologies modernes. Les nanomatériaux peuvent jouer un rôle majeur dans nombreux domaines scientifiques, technologiques et industriels. D'autre part, les nanostructures magnétiques ont attiré

l'attention des chercheurs théoriciens et expérimentateurs [61-67], grâce à leurs propriétés fascinantes. En outre, les propriétés magnétiques du model d'Ising ayant des interactions multi-spins ont montré un intérêt aussi bien théorique que expérimental. Les modèles des interactions multi-spins sont appliqués sur des systèmes physiques diverses comme : les fluides classiques [68], les alliages binaires [69], les couches lipidés [70], les gaz rares [71] et méta-aimants [72]. D'autre part, plusieurs études expérimentales et théoriques des fullerènes ont été réalisées en ces dernières années. Un intérêt important est accordé aux fullerènes grâce à ces nombreux avantages comme matériels potentiels pour les spintroniques organiques. En effet, les fullerènes et leurs dérivées sont des blocs de construction des appareils organiques performants à grand potentiel [73-78]. Durant ces dernières années, on a montré que le type d'un fullerène C_{60} peut induire la reconstruction de la surface métallique non-magnétique, i.e. le réarrangement avec des liens différents des atomes de surface [79,80].

Beaucoup de travaux ont focalisé leurs études sur les couches alternées des nanostructures [81-86] dont les résultats ont montré un comportement critique très intéressant pour ces nanoparticules dans plusieurs phénomènes. Les nanostructures magnétiques cœur-surface, en anglais: core-shell, ont attiré une vaste attention grâce à leurs propriétés physiques et chimiques, dont elles sont reliées en structure par cœur, surface et interfaces [87-90]. En effet, cet inhabituel intérêt offre des chances nombreuses pour une amélioration progressive et une émergence en différents domaines scientifiques. Quelques récentes études [91-93] ont été réalisées et développées pour déterminer les propriétés magnétiques des nanostructures. L'étude des propriétés magnétiques des nanostructures a montré le comportement des nanoparticules. Pourtant, les applications technologiques ont développé ce domaine pour réaliser des bénéfices économiques en différentes sections, notamment, les simulations par ordinateur [94,95]. Théoriquement, plusieurs études ont démontré les propriétés ferromagnétiques des nano-systèmes, dont les résultats trouvés sont très riches concernant le comportement critique. Aussi les phénomènes découverts sont très intéressants comme le mouillage magnétique et les transitions des couches magnétiques. Ces transitions ont été trouvées dans divers systèmes expérimentaux y compris, par exemple : ^4He [96, 97] et l'éthylène [98-100] absorbés dans le graphite. Plusieurs auteurs ont effectué des calculs

basés sur les diagrammes de phase et les propriétés magnétiques. Ils ont montré l'existence des transitions des couches magnétiques dans plusieurs systèmes ferromagnétiques. Les transitions des couches magnétiques trouvées dans les diagrammes de phase peuvent présenter des états différents. Utilisant la théorie de perturbation, Harris *et al.* [101] ont trouvé les transitions des couches magnétiques à $T = 0$ K, en présence du champ magnétique transverse.

Commençant par les propriétés théoriques, les nanomatériaux ont été étudié par plusieurs techniques tels que; la théorie du champ effectif (EFT) [102, 103], les premiers principes de la théorie fonctionnel de la densité (DFT) [104-106], la théorie du champ moyen (MFT) [107, 108], et les simulations de Monte Carlo (MCS) [109–111]. Ces nanomatériaux ont fait l'objet des études pour étudier les propriétés magnétiques [112] et les propriétés physiques [113], ainsi leurs comportements. La méthode de Monte Carlo a permis d'obtenir un nombre de propriétés caractéristiques spécifiques à ces systèmes.

En revanche, Canko *et al.* [114] ont étudié la dépendance des propriétés magnétiques de deux nanotubes sous l'effet d'un champ cristallin, en utilisant la théorie du champ moyen (EFT) [115-117]. Quelques phénomènes caractéristiques ont été trouvé, tel que ; les points critiques. D'autre part, Akinci *et al.* ont étudié le comportement dynamique d'un site dilué ferromagnétique sous l'effet du champ magnétique oscillant périodiquement par l'utilisation de la méthode du champ moyen (EFT) [118,119]. Par ailleurs, Jiang *et al.* [120] ont étudié les propriétés magnétiques et le comportement de compensation dans un matériau ferromagnétique à spins mixtes (3/2,1) dont deux points de compensation sont indiqués. Quelques études récentes ont utilisé la méthode de Monte Carlo pour étudier les propriétés magnétiques d'un hexagonal (nano-wire) avec une mixture de spin dans un matériau ferromagnétique spin-1 en surface et spin-3/2 en cœur [121-123]. D'autres travaux ont étudié en utilisant des simulations Monte Carlo pour monter les propriétés dynamiques des transitions de phase [124]. Par contre, la dépendance des paramètres dans l'Hamiltonien, tel que: le champ magnétique a permis d'obtenir des diagrammes de phase correspondants aux propriétés magnétiques de ces systèmes [125,126]. Sur le plan numérique, différentes études ont été réalisées à partir des simulations Monte Carlo basées sur l'algorithme de Metropolis pour le modèle d'Ising [127-130]. Nos travaux de recherche portent sur l'utilisation de la

méthode de Monte Carlo pour étudier les propriétés magnétiques des nanomatériaux de grande complexité. Des phénomènes intéressants sont observés dans ces systèmes. Il est donc absolument nécessaire de faire appel à différentes techniques de calculs des aimantations aussi bien statiques que dynamiques. Parmi ces techniques, la méthode de Monte Carlo reste un bon choix pour la modélisation des systèmes ayant une nanostructure.

Ce mémoire de thèse est composé de cinq chapitres. Le premier chapitre est consacré à la méthode de Monte Carlo et à la théorie des graphes. Les différents algorithmes de la simulation Monte Carlo ont été définis et expliqués. Ensuite, les conditions aux bords sont abordées. Quelques techniques statiques de simulation qui permettent de générer numériquement les configurations sont données à la fin de ce chapitre.

Le second chapitre est basé sur l'étude des phénomènes critiques, ainsi que leurs définitions. En particulier, les transitions de phase, le phénomène du mouillage magnétique et le phénomène de l'ordre et le désordre ont été introduits.

Le troisième chapitre est consacré à la présentation des résultats obtenus dans nos différents travaux de recherches. En effet, nous avons appliqué la méthode de Monte Carlo pour trouver les propriétés magnétiques des nanomatériaux ferromagnétiques type core/shell. En outre, dans ce chapitre nous traitons l'étude des phénomènes critiques et les transitions de phase. Ainsi nous avons mis en évidence les résultats obtenus pour la température de compensation, le comportement des aimantations et les cycles d'hystérésis des nanomatériaux étudiés.

Le quatrième chapitre est consacré à la présentation et l'interprétation des résultats de nos contributions avec l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux de types dendrimères. Nous avons présenté les résultats se rapportant à l'étude d'une classe particulière des dendrimères : PAMAM (Polyamidoamine). Cette classe particulière des nanostructures présente des propriétés structurelles intéressantes.

Dans le cinquième chapitre, nous présentons nos résultats sur les propriétés magnétiques des nanomatériaux type fullerènes par la méthode Monte Carlo. Ces résultats ont fait l'objet de plusieurs publications dans des journaux internationaux. En conséquence, nous avons abordé

les différentes formes des fullerènes en dégageant toutes les informations concernant leurs comportements magnétiques.

Ce mémoire de thèse est clôturé par une conclusion générale contenant les idées primordiales discutées tout au long de ce document, ainsi que d'éventuelles perspectives.

Liste des contributions et communications

La préparation de cette thèse de doctorat a été accompagnée par des publications apparues dans des revues internationales. La liste de ces travaux est donnée comme suit :

Contributions et Publications

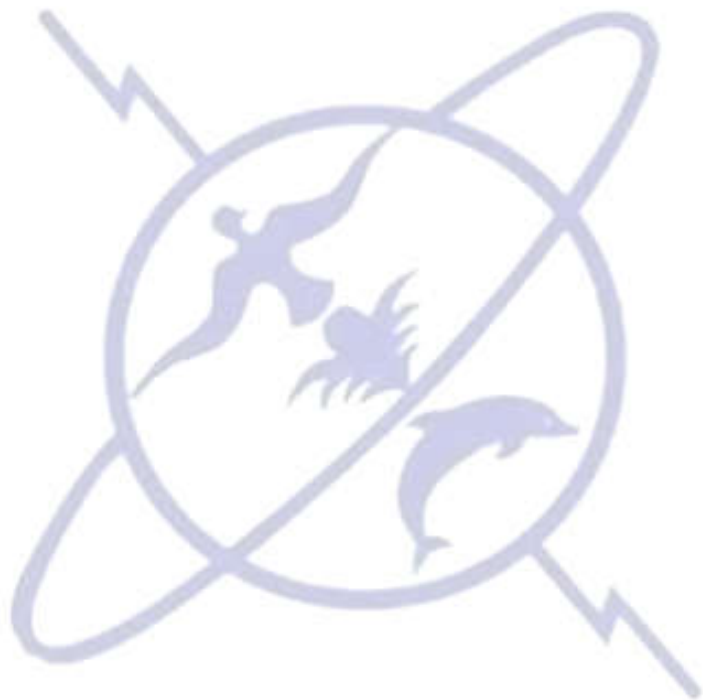
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Monte Carlo Study of core/shell Polymer Nano-Structure Systems, Journal of Solid State Communications, Vol. 267, (2017), 57-62, DOI: 10.1016/j.ssc.2017.09.020.
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Monte Carlo Study of the Core-Shell Phase Transitions in Nanostructure Systems, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, (2017), 1-6, DOI: 10.1007/s10948-017-4282-3.
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Study of a Nano-Square Structure with Defects: Monte Carlo Study, submitted on (2017), submits/1941692 have been assigned the permanent arXiv identifier 1707.01731.
- A. Mhirech, **S. Aouini**, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, Study of RKKY Interactions in a Bilayer Graphene Structure with Non-equivalent Planes, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, Vol. 30(11), (2017), 3189–3198, DOI: 10.1007/s10948-017-4146-x.
- S. Ziti, **S. Aouini**, H. Labrim, L. Bahmad, Magnetic layering transitions in a polyamidoamine (PAMAM) dendrimer nano-structure: Monte Carlo study, Journal of Materials Research Express, Vol. 4(2), (2017), 026102, DOI: 10.1088/2053-1591/aa5b51.

- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Monte Carlo Study of the Magnetic Order-Disorder Layering Transitions in a Polyamidoamine (PAMAM) Dendrimer Nanostructure, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, Vol. 30(6), (2016), 1557–1563, DOI: 10.1007/s10948-016-3932-1.
- A. Mhirech, **S. Aouini**, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, Monte Carlo Study of the Magnetic Properties in a Fullerene-Like Structure: X_{20} , X_{60} , or X_{70} , *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, Vol. 30(4), (2016), 925-930, DOI: 10.1007/s10948-016-3867-6.
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Compensation temperature in a nano-square with a core-shell structure: Monte Carlo study, *Journal of Superlattices and Microstructures*, Vol. 100, (2016), 246-251, DOI: 10.1016/j.spmi.2016.09.032.
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Wetting and layering transitions in a nano-dendrimer PAMAM structure: Monte Carlo study, *Journal of Materials Research Express*, Vol. 3(10), (2016), 106104, DOI: 10.1088/2053-1591/3/10/106104.
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Monte Carlo Study of a Nano-hexagonal Structure: Wetting and Layering Transitions, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, Vol. 30(2), (2016), 455-462, DOI: 10.1007/s10948-016-3712-y.
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Wetting and Layering Transitions in a Nano-Square Structure: Monte Carlo Study, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, Vol. 29(9), (2016), 1-7, DOI: 10.1007/s10948-016-3577-0.
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Wetting and layering Transitions in a Nano-Shell Structure: Monte Carlo Study, *Journal of Solid State Communications*, Vol. 241, (2016), 14-19, DOI: 10.1016/j.ssc.2016.05.003.
- A. Mhirech, **S. Aouini**, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, Magnetic Properties and Compensation Behavior in a Double Fullerene Structure, (Article: Travail soumis pour publication) (2017).
- A. Mhirech, **S. Aouini**, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, Magnetic Properties of Mixed Spins in a Fullerene $X_{30}Y_{30}$ like Structure: Monte Carlo Study, *J. of Low Temperature Physics*, Vol. 192 (1-2), (2018), 65-74.

- **S. Aouini**, A. Mhirech, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad Magnetic Properties in Different Fullerenes X_n like Nano-Structures: Monte Carlo Study, Chinese Journal of Physics, (2018), DOI: 10.1016/j.cjph.2018.05.012.
- A. Mhirech, **S. Aouini**, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, Bi-layer Graphene Structure with Non-Equivalent Planes: Magnetic Properties Study, of Superlattices and Microstructures, Vol. **117**, (2018), 382-391. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.03.073>
- **S. Aouini**, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Magnetic Properties of a Lieb Core Shell Nano-Structure: Monte Carlo Study, (Article: Travail soumis pour publication) (2018).
- **S. Aouini**, T. Sahdane, A. Mhirech, L. Bahmad, B. Kabouchi, Magnetic properties of the compound M_nB_i : Monte Carlo simulations, (Article: Travail soumis pour publication) (2018).

Communications:

- La seconde conférence internationale sur les sciences et l'ingénierie des matériaux pour l'énergie verte IMSEGEC-18 à l'université Mohammed V – Rabat (Poster).
- Journées Nationales des Doctorants et des Jeunes Chercheurs à l'ENSET – Rabat (Poster).
- La première conférence internationale sur les sciences et l'ingénierie des matériaux pour l'énergie verte IMSEGEC-17 à l'université AL AKHAWAYN – Ifran (Deux posters).
- La quatrième conférence Arab-Euro sur l'enseignement supérieur AECHE en « Research for Sustainable Societies: The Role of Universities » à la Faculté de Médecine Dentaire – Rabat (Poster).
- La conférence DEMESYS à MASciR – Rabat (Deux posters).



Chapitre 1

Simulations de Monte Carlo et théorie des graphes

1.1 Les différents modèles de spin

1.1.1 Modèle d'Ising

Le plus célèbre et le plus simple modèle, de la physique statistique décrivant un système magnétique, est le modèle d'Ising [131] défini à partir des variables de spin $\sigma_i = \pm 1$ dont l'Hamiltonien est :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} S_\alpha S_\beta - H \sum_\alpha S_\alpha \quad (I.1)$$

Où H est le champ magnétique appliqué, J est le couplage d'échange limité en général aux paires de premiers proches voisins. Les exemples de systèmes réels décrits par le modèle d'Ising bidimensionnel sont nombreux dans différents domaines comme par exemple les fluides binaires, les alliages et les aimants uni-axiaux [132, 133].

1.1.2 Modèle XY

Une autre famille importante de modèles abondamment étudiés en physique statistique est le modèle XY et le modèle de Heisenberg. Le modèle XY classique est défini par l'Hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (I.2)$$

Où les variables θ_i varient continument dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. Un très grand nombre de systèmes physiques réels peuvent être décrits par le modèle XY, par exemple des superfluides, des supraconducteurs. La mise en ordre dans les cristaux liquides ou la transition rugueuse [134,135] est aussi décrite par ce modèle. En effet, la transition de la

phase désordonnée vers la phase ordonnée est décrite en termes de vortex libres dans la phase haute température et de vortex liés dans la phase basse température [136,137].

Le modèle XY peut également être défini à partir de spins vectoriels à 2 dimensions S_i de valeur absolue $S_i^2 = 1$:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (I.3)$$

Si l'on considère des spins vectoriels tridimensionnels, on obtient le modèle classique de Heisenberg. Dans le cas des films minces, l'anisotropie de surface est susceptible de stabiliser l'ordre à grande distance à des températures finies. Par exemple, pour des films minces avec une symétrie cubique, il existe une anisotropie uni-axiale, perpendiculaire ou parallèle au plan du film, la transition appartient à la classe universelle du modèle d'Ising 2D [138]. S'il n'y a pas d'anisotropie de surface uni-axiale, l'aimantation se trouve dans le plan du film. Le comportement critique peut alors dépendre des champs cristallins à l'intérieur du plan et conduit éventuellement à un comportement critique non universel comme pour le modèle XY [139].

1.1.3 Modèle d'Heisenberg

Dans le modèle d'Heisenberg les spins sont des vecteurs unitaires à 3D [140,141]. En effet, les spins d'Heisenberg sont représentés soit par des vecteurs à trois composantes $S_x, S_y,$ et S_z tel que $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 1$, ou bien par deux angles variables θ et Φ en coordonnées sphériques [142]. Dans ce cas, l'Hamiltonien prend la forme suivante :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_{xi} S_{xj} + S_{yi} S_{yj} + S_{zi} S_{zj} - \sum_i H_x S_{xi} + H_y S_{yi} + H_z S_{zi} \quad (I.4)$$

Où J est la constante d'échange et h_x, h_y et h_z sont les composantes du champ magnétique suivant les axes x, y et z respectivement. Le modèle d'Heisenberg est un modèle de spin qui permet de traiter directement la dépendance en spin d'un système de plusieurs électrons.

1.2 Algorithmes de la simulation Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo a vu son essor à partir de la fin des années quarante, essentiellement dans le cadre du projet américain "Manhattan" concernant le développement

des dispositifs nucléaires. Cette époque a également vu la construction des premiers "ordinateurs". Il est difficile de savoir exactement qui parmi ses pionniers : Von Neumann, Ulam, Metropolis a proposé le nom de "Monte Carlo". Quoi qu'il en soit, ce terme fait référence aux jeux de hasard : la capitale de la principauté de Monaco, avec ses salles de jeux, ayant dès cette époque une solide réputation dans la société mondaine internationale.

En l'occurrence, la méthode de Monte Carlo consiste à simuler sur ordinateur un phénomène stochastique par essence : la diffusion de neutrons dans des matériaux fissiles.

Un ordinateur effectue une suite d'opérations parfaitement déterministes, comment alors simuler le hasard sur un ordinateur ? On génère des suites de nombres "pseudo aléatoires" qui ont les mêmes propriétés statistiques que des nombres aléatoires, mais qui ne sont pas aléatoires.

L'idée de base du calcul de Monte Carlo est de générer un nombre raisonnable des configurations en « random ». Lorsqu'on souhaite minimiser une fonction à grand nombre de variables, les méthodes classiques n'ont aucune difficulté pour trouver des minima locaux (en général le plus proche d'un point défini comme point de départ de la méthode). Il est par contre pratiquement impossible de trouver le minimum absolu. Seule, la méthode de Monte Carlo permet de résoudre ce problème. La méthode de Monte Carlo explore tout l'espace des phases, mais on peut perdre du temps à ne pas progresser dans une région de l'espace des phases qui contribue peu à l'intégrale. Sur le plan des simulations numériques, en particulier les simulations Monte Carlo qui sont réalisées à l'échelle atomique, l'évolution vers l'échelle nanométrique de l'étude des matériaux combinée à l'accroissement continu des performances numériques des calculateurs autorise aujourd'hui une étude pratiquement à l'échelle de certaines propriétés physiques puisque les nombres d'atomes mis en jeu peuvent être de quelques milliers à quelques millions. C'est à partir de ce constat que nous avons entrepris progressivement l'étude de nanoparticules magnétiques et de multicouches magnétiques d'épaisseur nanométrique de structure amorphe ou poly-cristalline. Les simulations de Monte Carlo (MCS) sont utilisées pour explorer et faire la lumière sur certaines des propriétés magnétiques de notre système. En utilisant des méthodes de simulation statistique, où la simulation statistique est décrite en termes généraux comme tout processus qui utilise des

séquences de nombres aléatoires pour faire fonctionner la simulation est l'objectif de notre choix des simulations de Monte Carlo [143-146]. Ces simulations sont basées sur l'algorithme de Metropolis [147,148] en générant de nouvelles configurations avec un grand succès pour inspecter le comportement magnétique.

Ces méthodes sont tout à fait réussies pour la simulation des systèmes éléments fortement couplés, par pic à partir d'une distribution de probabilité, généralement la distribution de Boltzmann, lorsque l'objectif est d'obtenir des structures d'énergie minimale à une certaine température lorsque les étapes de Monte Carlo rassurent l'équilibre du système. Les trois étapes de Monte Carlo sont exécutées pour différentes conditions initiales, après avoir éliminé les premières étapes pour éliminer les conditions initiales pour chaque exécution. La méthode de Jackknife [149] a été utilisée pour calculer les barres d'erreur.

Le but de ce travail est de développer sur des techniques de simulation moléculaire pour simuler des nano-systèmes afin que nous puissions mieux comprendre leurs propriétés magnétiques. Une grande partie de la difficulté à exécuter des simulations atomistiques de se trouver avec la mise en place des conditions initiales raisonnables qui peuvent être utilisés par la mécanique moléculaire et des programmes de dynamique moléculaire. L'état actuel de la technique dans la mise en place des simulations atomistiques est d'utiliser une configuration basée sur la méthode de Monte Carlo. La simulation de Monte Carlo crée une conformation initiale aléatoire avec quelques mauvais contacts entre les atomes du système étudié. Les étapes de Monte Carlo par spin se déroulent pour atteindre l'équilibre, par des sites visités du système. Les pas de MCS sont effectués pour des conditions initiales différentes. Les barres d'erreur ont été calculées avec la méthode de Jackknife.

1.2.1 La méthode Monte Carlo

La méthode Monte Carlo est une méthode stochastique qui est basée sur le principe des chaînes de Markov. Cette méthode consiste à générer une suite de n configurations (X_1, \dots, X_n) pour lesquelles la densité de probabilité $P_n(X)$ converge vers une densité d'équilibre $P(X)$. Dans notre cas, chaque configuration X est un élément de l'espace des phases Ω et correspond à un ensemble de N spins $X = (S_1, S_2, \dots, S_i, \dots, S_N)$. La probabilité

de transition $W(X \rightarrow X')$ de l'état X vers l'état X' doit satisfaire la relation appelée condition de stationnarité :

$$\forall X', X \in \Omega, \sum_{X'} W(X, X')P(X') = \sum_X W(X, X')P(X) \quad (I.5)$$

Cette relation exprime l'égalité des probabilités de transition d'un état X vers un état X' et d'en partir. Dans les faits, cette condition est généralement remplacée par une autre plus restrictive, appelée condition de réversibilité microscopique :

$$W(X, X')P(X') = W(X', X)P(X) \quad (I.6)$$

1.2.2 Algorithme de Metropolis

L'algorithme de Metropolis est l'algorithme « standard » de la méthode Monte Carlo dans l'ensemble canonique [150]. La distribution de probabilité à l'équilibre à la température T est définie par :

$$P_T(X) = \frac{e^{-\frac{E(X)}{k_B T}}}{\sum_X e^{-\frac{E(X)}{k_B T}}} \quad (I.7)$$

Et la condition de réversibilité microscopique conduit à :

$$\frac{W(X \rightarrow X')}{W(X' \rightarrow X)} = e^{-\beta(E_{X'} - E_X)} \quad (I.8)$$

Avec $\Delta E = E(X') - E(X)$ dans le cadre de l'algorithme de Metropolis, le passage d'une configuration X à une autre configuration X' se fait par un changement d'état d'un seul spin à la fois :

$$X = (S_1, S_2, \dots, S_i, \dots, S_N) \rightarrow X' = (S_1, S_2, \dots, S'_i, \dots, S_N) \quad (I.9)$$

La méthode de Metropolis consiste à prendre $W(X \rightarrow X') = \min\{1, \exp(-\frac{\Delta E}{k_B T})\}$ qui vérifie la relation (I.8).

L'algorithme de Metropolis consiste à calculer ΔE :

Si $\Delta E \leq 0$ on accepte le changement d'état : $X \rightarrow X'$.

Si $\Delta E > 0$ on admet le changement d'état : $X \rightarrow X'$ avec la probabilité $P(X \rightarrow X') = e^{-\beta \Delta E}$.

On génère un nombre aléatoire ξ , tel que : $0 \leq \xi \leq 1$

Si $\xi \leq P(X \rightarrow X')$ on assiste au changement d'état : $X \rightarrow X'$, sinon on garde la configuration initiale.

L'algorithme de Metropolis est présenté comme suit :

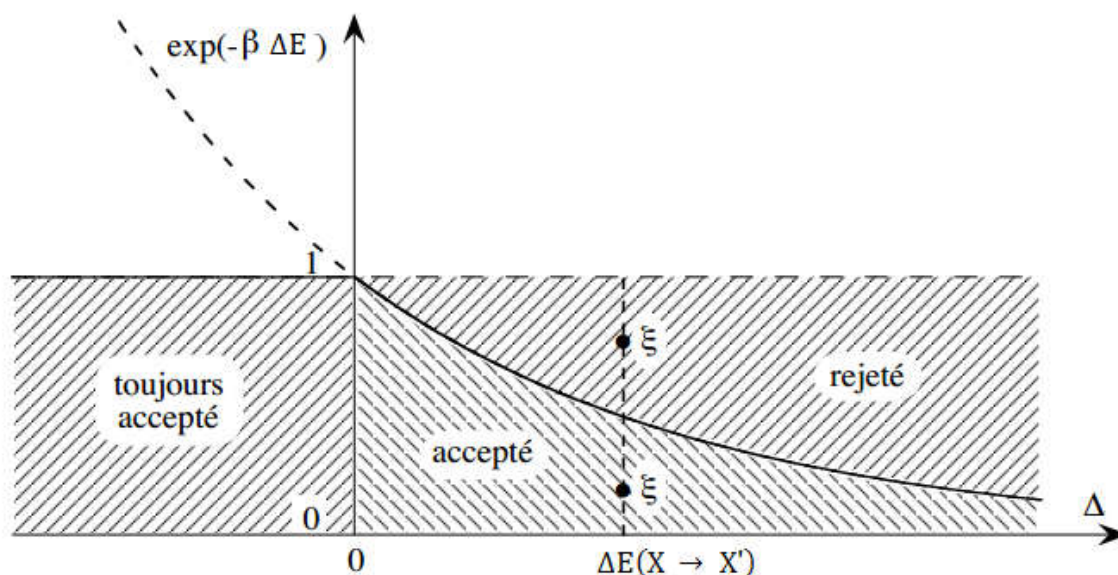
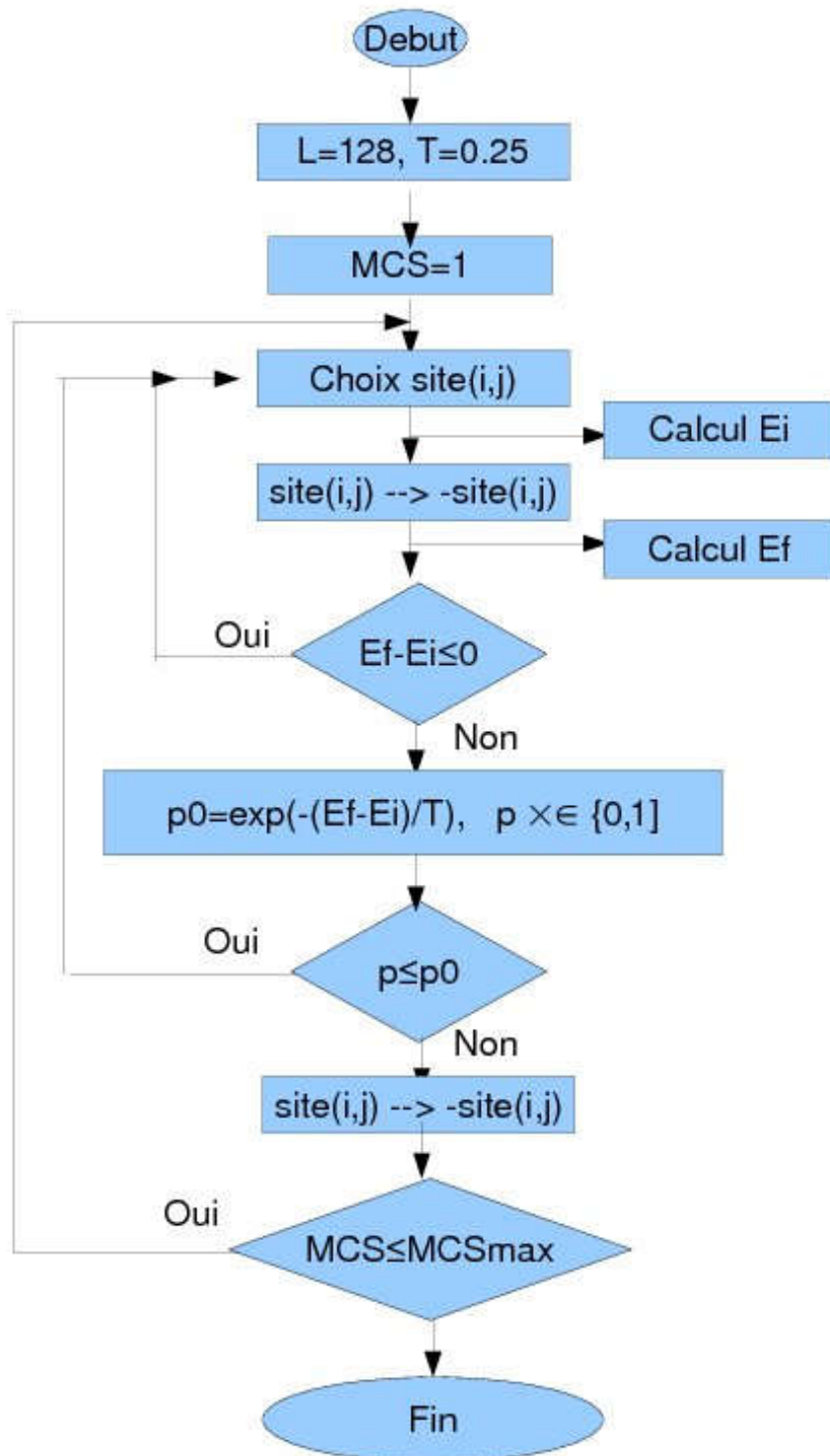


Figure I.1 : Critère d'acceptation de la méthode de Metropolis.

Lorsque le système atteint l'équilibre, à ce moment là qu'on peut commencer le calcul d'une moyenne thermique. En général, il y a deux étapes dans une simulation Monte Carlo: la première consiste à démarrer d'une configuration initiale, puis réaliser une dynamique afin d'amener le système près de l'équilibre dont l'énergie se stabilise autour d'une valeur quasi-stationnaire. La seconde étape correspond à un état où le système évolue au voisinage de l'équilibre. Ensuite on calcul les moyennes des grandeurs physiques.



Organigramme de Monte Carlo

Figure I.2 : Organigramme de la méthode Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis.

1.2.3 Algorithme de BKL (Bortz, Kalos, Lebowitz)

L'algorithme de Bortz, Kalos et Lebowitz (BKL) est utilisé dans le cas où l'on applique la méthode de Monte Carlo cinétique. L'algorithme de Monte Carlo cinétique (BKL) est utilisé pour modéliser les sauts aléatoires d'un système d'un état initial vers un ensemble d'états finaux possibles. Cette méthode a été introduite par Bortz, Kalos et Lebowitz (1975) [151]. La méthode de Monte Carlo cinétique n'est pas aussi largement utilisée comme elle devrait l'être. C'est une technique importante et puissante dont les calculs peuvent être effectués à plusieurs reprises [152]. Les systèmes à basse température sont toujours un problème pour les méthodes de Monte Carlo où le passage d'un état à un autre est très lent et le taux d'acceptation est faible. En effet, le système passe la majorité du temps dans l'état fondamental. Dans cette technique de Monte Carlo cinétique, l'étape de temps dépend de l'estimation du temps pendant lequel le système reste dans son état avant de passer à un nouvel état. L'algorithme de BKL sélectionne un mouvement possible à un certain état excité, mais le taux d'acceptation est très faible et pratiquement toutes les configurations possibles sont rejetées. Le système finit simplement par dépenser la plupart de son temps 't' dans l'état fondamental. Soit Δt le temps que le système passe dans un état X avant de passer à un autre état X'. Ce temps Δt est obtenu à partir de la probabilité $w(X \rightarrow X')$ [148]. Cette probabilité de rester dans l'état X avant de passer dans l'état X' est :

$$[w(X \rightarrow X')]^t = e^{t \log w(X \rightarrow X')} \quad (I.10)$$

Le temps Δt est donné par :

$$\Delta t = \frac{1}{\log w(X \rightarrow X')} = - \frac{1}{\log[1 - \sum_{X' \neq X} w(X \rightarrow X')]} \approx \frac{1}{\sum_{X' \neq X} w(X \rightarrow X')} \quad (I.11)$$

Pour calculer ce temps Δt , on garde cet état et on passe directement à un autre état, au lieu d'attendre plusieurs étapes Monte Carlo pour que le changement soit effectué. L'algorithme de Monte Carlo cinétique BKL, à temps continu, se compose par les étapes suivantes:

- On évalue les probabilités $w(X \rightarrow X')$ à partir de l'état X. On choisit un nouvel état X' avec une probabilité proportionnelle à $w(X \rightarrow X')$ et on change l'état de système à l'état X'.

- On calcule le temps Δt et on le recalcule à chaque étape, en incrémentant le temps 't' de Δt pour tenir compte du temps que le système passe dans le même état.

Cette technique est pratique pour les problèmes de la simulation d'un système à basse température. Elle possède quelques inconvénients qu'il faut prendre en compte:

- Dans la première étape, le nombre des états X' croît exponentiellement avec la taille du système et le temps pour calculer les probabilités $w(X \rightarrow X')$ est alors long.
- Souvent l'ensemble des probabilités de transition ne change pas beaucoup d'une étape à une autre. Il est donc possible de ne stocker à chaque étape que les nouvelles configurations.

1.3. Conditions aux bords

Les simulations Monte Carlo sont généralement restreintes à un nombre de particules compris entre la centaine et quelques milliers (un système fini), tandis que l'intérêt de cette étude est de définir les propriétés d'un système infini. En toute rigueur, l'étude complète d'un système se base sur sa nature du problème considéré. Pour pouvoir corréler les propriétés d'un système, il est impératif de s'affranchir des effets de bord ou bien les conditions aux bords.

Le traitement du problème aux limites est un point important dans la méthodologie de la dynamique des dislocations. Selon la nature du problème, il existe plusieurs types des conditions aux limites.

1.3.1 Conditions aux limites périodiques

Comme les systèmes que l'on peut simuler sont de taille finie, le rapport de la surface sur le volume de l'échantillon est généralement important. Pour éviter ces effets de surface, les systèmes sont généralement simulés avec des conditions aux limites périodiques [153]. A deux dimensions, cela signifie que la boîte de simulation doit paver le plan : à cause des contraintes géométriques, deux types de boîte sont possibles : un carré et un hexagone. Les conditions aux limites périodiques sont générées comme suit : Partant d'une boîte donnée, toutes les boîtes voisines sont dessinées avec la même configuration. Pour chaque site, on détermine les plus proches voisins [147] avec la règle suivante : Quand l'état d'un spin a été

changé, toutes les configurations sont mises à jour dans le même temps. Autrement dit, le réseau original peut être vu comme un réseau sur un tore.

1.3.2 Conditions aux limites périodiques vis

Ce type de conditions aux limites ne met en évidence que les différences entre les solutions calculées avec des conditions aux limites homogènes en contrainte ou en déformation, elles ne sont significatives que sur les bords du système. Dans cette approche, les spins sur le réseau sont représentés en tant qu'entrées dans un vecteur unidimensionnel enroulé autour du système [147]. Alors que pour le modèle d'Ising bidimensionnel, le dernier spin dans une ligne et le premier spin dans la ligne suivante sont proches voisins. Pour ce fait, ce type de conditions considère une limite enroulable.

1.3.3 Conditions aux limites anti-périodiques

Les conditions anti-périodiques sont définies par une interaction artificielle consistant à un changement de signe du couplage aux bords du système. Les conditions anti-périodiques sont les mieux adaptées pour minimiser les interactions entre la dislocation émergente dans ce type de conditions [154]. Elles s'effectuent selon la direction normale à l'interface que l'on souhaite étudier, tandis que les conditions aux limites périodiques seront appliquées dans l'autre direction.

1.3.4 Conditions aux bords libres

Dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel, les spins à la fin d'une ligne ne possèdent aucun proche voisin car ce type de conditions ne comporte aucun type de connexion entre la fin d'une ligne et de n'importe quelle autre ligne dans un réseau. De plus, les propriétés des systèmes avec des conditions aux bords libres diffèrent des propriétés du système infini avec des conditions aux limites périodiques. Les limites aux bords libres constituent l'approche la plus réaliste pour certaines situations tel que la modélisation du comportement des particules ou des nanoparticules super-paramagnétiques.

1.4 Les techniques statiques

Une bonne compréhension de la simulation Monte Carlo consiste à bien connaître les principes élémentaires de cette technique, que nous allons expliquer dans cette partie. Nous rappelons que dans tout ce travail, nous avons appliqué les simulations Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis.

1.4.1 Formulation du modèle de calcul

Le but de la méthode de Monte Carlo est de simuler les variations thermiques aléatoires du système d'un état à un autre. Au cours de cette simulation, il est nécessaire de choisir une règle qui gère ce passage d'un état à un autre dont la probabilité de trouver le système dans l'état X est égale au poids de cet état dans le système réel [148]. La formulation du modèle de calcul est représentée par l'évolution de la probabilité de chaque état, cela veut dire une excellente estimation des grandeurs physiques ainsi que ce modèle conduit aux erreurs statistiques. Cette formulation est traduite dans un premier temps par:

$$\frac{dp_X}{dt} = \sum_{X'} (p_{X'}(t)w_{X'X} - p_X(t)w_{XX'}) \quad (I.12)$$

Avec : $p_X(t)$ est la probabilité de trouver le système dans l'état X à l'instant t alors que $w_{XX'}$ est la probabilité de passer de l'état X à l'état X' par unité de temps. Cette probabilité est choisie dans la solution de la formulation de calcul qui intègre la distribution de Boltzmann suivante :

$$p_X = \frac{e^{-\frac{E_X}{k_B T}}}{Z} \quad (I.13)$$

Avec : E_X représente l'énergie de l'état X alors que k_B est la constante de Boltzmann, T est la température absolue, Z est la fonction de partition du système.

1.4.2 Principes de la simulation Monte Carlo

Toute simulation Monte Carlo commence par définir le problème à résoudre, ainsi que sa géométrie. La taille du système, le type de spin et la nature des couplages magnétiques. Les conditions aux limites doivent être aussi bien définies. La simulation Monte Carlo se compose par les trois étapes suivantes :

- L'échantillonnage

Dans le cas de l'application de la méthode de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis [147,155], les états dominants sont issus d'un échantillonnage important. Alors que, la probabilité de Boltzmann mentionnée dans l'équation (I.13) distribue ces états dominants selon la valeur fixée de la température et de l'énergie de l'état X, cela permet d'améliorer l'estimation.

- La balance détaillée

La distribution de la probabilité de Boltzmann est assurée par la condition de la balance détaillée celle-ci est générée après que le système ait atteint l'équilibre.

Dans le cas d'équilibre, les taux de transition à partir d'un état vers le même état sont égaux, alors :

$$\sum_{X'} p_X w(X \rightarrow X') = \sum_{X'} p_{X'} w(X' \rightarrow X) \quad (I.14)$$

Puisque :

$$\sum_{X'} w(X \rightarrow X') = 1 \quad (I.15)$$

On a :

$$p_X = \sum_{X'} p_{X'} w(X' \rightarrow X) \quad (I.16)$$

Puisque l'équation (I.14) est une sommation des probabilités:

$$p_X w(X \rightarrow X') = p_{X'} w(X' \rightarrow X) \quad (I.17)$$

Alors chaque état satisfait les deux équations (I.14) et (I.17). On peut dire alors que la condition de la balance détaillée élimine les cycles limites [152]. Une fois qu'on enlève les cycles limites, le système aura toujours une probabilité de distribution p_X dont le système peut quitter un état X vers un autre état X' indifféremment du chemin choisi lorsque t tant vers l'infini.

- Le taux d'acceptation

Le système passe la majorité du temps dans l'état fondamental, où le passage d'un état à un autre est très lent et le taux d'acceptation est faible. La méthode de Monte Carlo sélectionne un mouvement possible à un certain état excité, mais le taux d'acceptation est très faible et

pratiquement toutes ces configurations possibles sont rejetées. Le système finit simplement par dépenser la plupart de son temps dans l'état fondamental. Dans cette technique, l'étape de temps dépend de l'estimation du temps pendant lequel le système reste dans son état avant de passer à un nouvel état. D'après l'équation de la balance détaillée, les probabilités de transition doivent satisfaire :

$$\frac{w(X \rightarrow X')}{w(X' \rightarrow X)} = \frac{p_{X'}}{p_X} = e^{-\beta(E_{X'} - E_X)} \quad (I.18)$$

Pour créer un algorithme appliqué sous la méthode de Monte Carlo, on doit générer de nouveaux états aléatoires X à partir des anciens états X' avec un ensemble de probabilités. Lorsque le système atteint l'équilibre, toutes les exigences pour les probabilités de transition produiront une chaîne des états qui apparaîtront avec leurs probabilités de Boltzmann.

Dans la conception de l'algorithme appliqué à la méthode de Monte Carlo, si le rapport d'acceptation est faible alors cet algorithme paraîtra fixe et cela bloque naturellement l'évolution du système. A ce moment là on cherche un algorithme qui puisse évaluer entre les états pour un large échantillonnage. Un bon algorithme est celui qui va générer une probabilité d'acceptation proche de 1 [148] entre deux états distincts dans n'importe quelle direction, cela permet d'éviter que l'algorithme soit lent.

1.4.3 Temps d'équilibre

Le temps de calcul de la méthode de Monte Carlo dépend du nombre de tirages à effectuer. Ce nombre est directement lié à la précision recherchée sur les variables à modéliser, données par leur écart-type. Plus l'écart-type de la grandeur qu'on cherche à décrire est grand, plus il faudra un nombre de tirages élevé pour en donner une représentation précise. Ceci se comprend en raisonnant sur les cas limites. Si cet écart-type est nul, alors il n'y a qu'une valeur possible et le tirage d'un seul nombre aléatoire suffit. Si l'écart-type est infini (très grand) alors le nombre de valeurs à déterminer pour représenter correctement la grandeur l'est également.

En ce qui concerne nos calculs, la précision sur les paramètres étudiés est relativement simple à obtenir avec un nombre de tirages modéré. La simulation Monte Carlo ne prend pas alors en

considération toutes les configurations possibles donc les configurations les moins probables sont automatiquement éliminées par la fonction de probabilité de transition. Cela exige un certain temps « temps d'équilibre » [148, 152] pour faire tourner le programme dans le but d'éliminer les configurations initiales afin d'atteindre l'équilibre [147, 148]. Après l'équilibre, une nouvelle période d'estimation est calculée par la relation suivante :

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{X_i} \quad (I.19)$$

Dans cette équation la quantité physique Q_M correspond à la moyenne pour une taille M du système, correspondant à la configuration X_i . Dans le cas de l'aimantation ou bien l'énergie cette quantité physique permet de visualiser l'équilibre. Dans certains cas, on part de différentes configurations initiales pour éviter le fait que le système se piège dans un minimum local d'énergie.

1.4.4 Mesures

Les grandeurs physiques les plus intéressantes à mesurer afin d'atteindre l'équilibre sont calculées par les formules suivantes :

La différence des énergies est calculée par :

$$\Delta E = E_{X'} - E_X \quad (I.20)$$

La différence des aimantations est mesurée par :

$$\Delta M = M_{X'} - M_X = \frac{1}{N_{X'}} \sum_i S_i^{X'} - \frac{1}{N_X} \sum_i S_i^X = S_k^{X'} - S_k^X \quad (I.21)$$

Avec les aimantations qui sont données par :

$$M_X = \frac{1}{N_X} \sum_i S_i^X = S_k^X \quad (I.22)$$

$$M_{X'} = \frac{1}{N_{X'}} \sum_i S_i^{X'} = S_k^{X'} \quad (I.23)$$

La susceptibilité magnétique est calculée par :

$$\chi = \beta N (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (I.24)$$

Avec:

$$N = M_X + M_{X'} \quad (I.25)$$

$$M = \frac{\sum_i N_X^i M_X^i + N_{X'}^i M_{X'}^i}{N} \quad (I.26)$$

Dans l'équation (I.24) la constante de Boltzmann est défini par :

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (I.27)$$

Avec: T est la température absolue, ($k_B = 1$).

1.5 La théorie des graphes

La théorie des graphes est la discipline mathématique et informatique qui étudie les graphes, lesquels sont des modèles abstraits de dessins de réseaux reliant des objets. Ces modèles sont constitués par des points, appelés nœuds ou sommets, et des « liens » entre ces points; ces liens sont souvent symétriques (les graphes sont alors dits non orientés) et sont appelés des arêtes.

Les algorithmes élaborés pour résoudre des problèmes concernant les objets de cette théorie ont de nombreuses applications dans tous les domaines liés à la notion de réseau (réseau social, réseau informatique, télécommunications, etc.) et dans bien d'autres domaines (par exemple génétique). Le concept de graphe est à peu près équivalent à celui de relation binaire (à ne pas confondre donc avec graphe d'une fonction). De grands théorèmes difficiles, comme le théorème des quatre couleurs, le théorème des graphes parfaits, ou encore le théorème de Robertson-Seymour, ont contribué à asseoir cette matière auprès des mathématiciens, et les questions qu'elle laisse ouvertes, comme la conjecture de Hadwiger, en font une branche vivace des mathématiques discrètes.

1.5.1 Typologies des graphes

Il existe trois grandes familles de graphes et cinq catégories au total (voir la figure I.3):

A - Structurés : il est alors possible de définir quatre identités topologiques remarquables :

- * Homogènes (1) : les sommets et les arêtes reproduisent un schéma régulier. Le schéma le plus commun est une architecture de type matriciel aussi appelé "en filet de poisson" (mesh).
- * Hiérarchiques (2) : structure typique des graphes où les sommets s'arrangent en couches hiérarchisées et pyramidales.
- * Cycliques (3) : on peut identifier des cycles dans le graphe. L'exemple le plus parlant est le graphe circulaire.
- * Centralisés/Polaires (4) : c'est une architecture où tous les sommets sont rattachés à un seul sommet, le pôle.

B - Quelconques (5) : aucune propriété topologique ne semble émerger.

C - Multipolaires : c'est une architecture mixte entre les graphes centralisés et décentralisés. Les réseaux multipolaires sont très étudiés en raison de leur proximité avec de nombreux cas concrets et notamment Internet ou les réseaux de neurones. Les graphes multipolaires sont caractérisés par deux types d'arêtes, celles qui forment les liens émanant du pôle, les liens forts ; et les liens réunissant deux pôles entre eux : les liens faibles. Les pôles peuvent par ailleurs prendre une architecture structurée (souvent centralisée) ou quelconque.

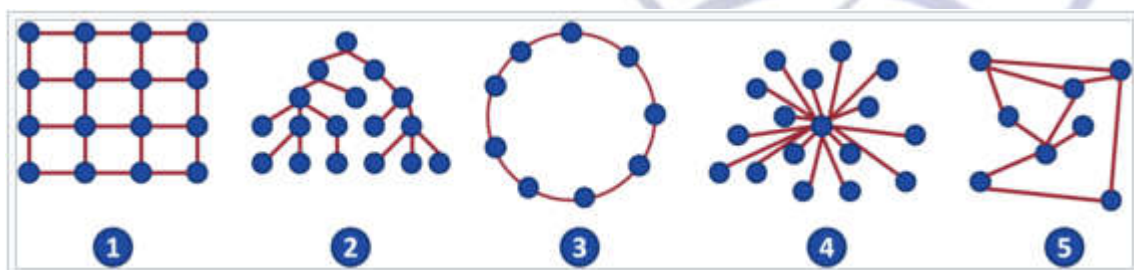


Figure I.3 : Les principales topologies typiques de graphes.

1.5.2 Graphes et algèbre linéaire

Tout graphe $G = (E, V)$ peut être représenté par une matrice. Les relations entre arêtes et sommets sont appelées les relations d'incidence, sont toutes représentées par la matrice d'incidence du graphe. Les relations d'adjacences sont représentées par sa matrice d'adjacence (si deux sommets sont reliés par une arête ils sont adjacents). Elle est définie par :

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } (v_i, v_j) \in E \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (I.28)$$

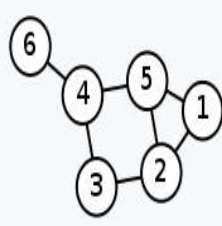
Graphe	Représentation par une matrice d'adjacence	Représentation par une matrice laplacienne (non normalisée)
	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & -1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Figure I.4 : un graphe peut être représenté par une matrice.

De nombreuses informations d'un graphe peuvent être représentées par une matrice. Par exemple, la **matrice des degrés** D est une **matrice diagonale** où les éléments D_{ii} correspondent au nombre de connexions du sommet « i », c'est-à-dire à son **degré**. En utilisant cette matrice et la précédente, on peut également définir la **matrice Laplacienne** $L = D - A$; on obtient sa forme normalisée L' par $L' = D^{-1/2} L D^{-1/2} = I - D^{-1/2} A D^{-1/2}$, où I dénote la **matrice identité**, ou on peut aussi l'obtenir directement par chacun de ses éléments :

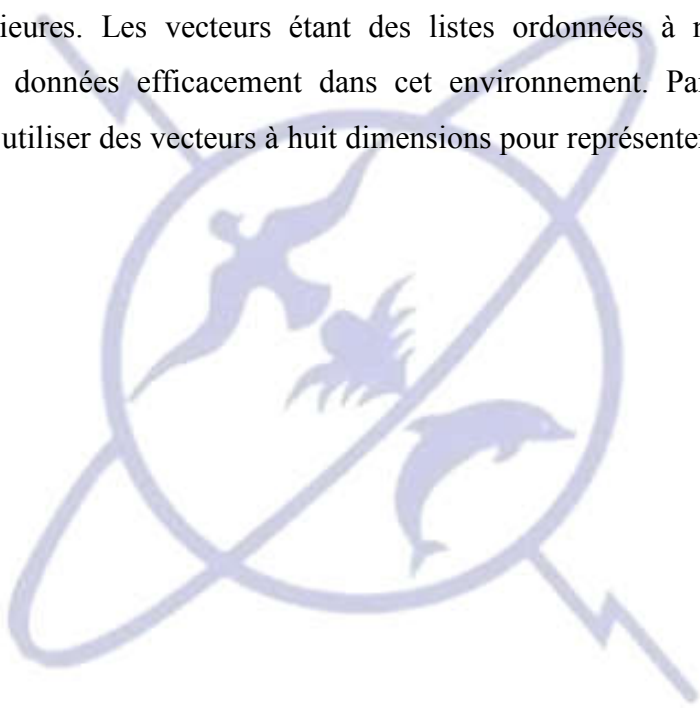
$$l_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \text{ et } \text{deg}(v_i) \neq 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{\text{deg}(v_i)\text{deg}(v_j)}} & \text{si } i \neq j \text{ et } v_i \text{ est adjacent à } v_j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (I.29)$$

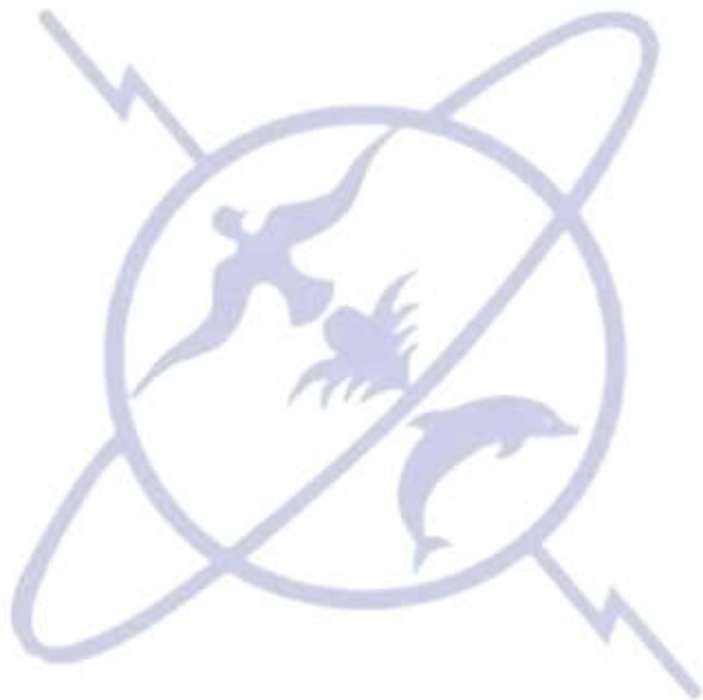
Ces représentations dépendent de la façon dont les sommets du graphe sont étiquetés. Imaginons que l'on garde la même structure que dans l'exemple ci-dessus et que l'on inverse les étiquettes 1 et 6 : on inverse alors les colonnes 1 et 6 de la matrice d'adjacence. Il existe en revanche des quantités qui ne dépendent pas de la façon dont on étiquette les sommets, tels que le degré minimal/maximal/moyen du graphe. Ces quantités sont des invariants du graphe : elles ne changent pas selon la numérotation. Tandis qu'une matrice d'adjacence ou Laplacienne varie, son spectre, c'est-à-dire l'ensemble de ses valeurs propres $\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{n-1}$ est un invariant. L'étude du rapport entre les spectres et les propriétés d'un graphe est le sujet de la théorie spectrale des graphes; parmi les rapports intéressants, le spectre donne des

renseignements sur le nombre chromatique, le nombre de composantes connexes et les cycles du graphe.

L'algèbre linéaire est la branche des mathématiques qui s'intéresse aux espaces vectoriels et aux transformations linéaires, formalisation générale des théories des systèmes d'équations linéaires. L'algèbre linéaire commence par l'étude de vecteurs dans les espaces cartésiens de dimension 2 et 3. Un vecteur, ici, est une classe d'équivalence de bipoints qui unifie les segments de droite caractérisés à la fois par leur longueur (ou norme), leur direction et leur sens : deux bipoints représentent un même vecteur si le quadrilatère formé sur les quatre points est un parallélogramme. Les vecteurs peuvent alors être utilisés pour représenter certaines entités physiques comme des déplacements, additionnés entre eux ou encore multipliés par des scalaires (nombres), formant ainsi le premier exemple concret d'espace vectoriel.

L'algèbre linéaire moderne s'intéresse beaucoup aux espaces de dimension arbitraire, éventuellement infinie. La plupart des résultats obtenus en dimension 2 ou 3 peuvent être étendus aux dimensions finies supérieures. Les vecteurs étant des listes ordonnées à n composantes, on peut manipuler ces données efficacement dans cet environnement. Par exemple en économie, on peut créer et utiliser des vecteurs à huit dimensions pour représenter le produit national brut de huit pays.





Chapitre 2

Étude des phénomènes critiques

2. 1 Phénomènes critiques

L'étude des phénomènes critiques ou transitions de phase constitue un sujet d'étude majeur en physique théorique depuis plusieurs décennies que ce soit en physique des particules ou en physique de la matière condensée. En effet, ces phénomènes se déroulent aux points critiques où les grandeurs physiques varient rapidement et présentent ainsi des discontinuités. D'autre part, les concepts de l'universalité [156] sur lesquels repose l'essentiel des développements récents dans ce domaine s'avèrent particulièrement féconds pour décrire des systèmes a priori très différents. Sur le plan théorique, l'universalité des phénomènes critiques est liée au caractère auto-similaire des configurations des variables en interaction qui permettent de renormaliser celles-ci. Un système critique est alors caractérisé par la disparition de toute échelle de longueur typique entre la distance moyenne entre variables (pas du réseau par exemple) et la taille du système macroscopique. Ce phénomène conduit à la divergence des fluctuations qui s'étendent à toutes les échelles de longueur ce qui conduit à l'invariance par dilatation et à l'apparition d'une forme singulière pour l'énergie libre. Ainsi, même dans le cas où les interactions sont limitées aux premiers voisins, l'information sur l'état d'une variable à une extrémité du système se transmet de proche en proche jusqu'à l'autre extrémité.

Le comportement dominant au point critique des grandeurs physiques ne dépendra pas des détails du système. C'est la raison pour laquelle une même classe d'universalité peut permettre de décrire des phénomènes aussi différents que l'aimantation d'un matériau ferromagnétique, le paramètre d'ordre d'un alliage binaire ou la transition de phase de certains supraconducteurs. Les paramètres essentiels permettant de définir une classe d'universalité seront alors la dimension de l'espace, la dimensionnalité du paramètre d'ordre, la portée des interactions. C'est pourquoi les modèles de variables en interaction les plus

simples jouent un rôle aussi important dans l'étude des phénomènes critiques. Ce chapitre est consacré à une brève description des transitions de phase et des phénomènes critiques.

2.1.1 Transition de phase

La transition de phase est un phénomène dont les interactions entre champs et particules brisent spontanément la symétrie du système [157] permettent de classer les différentes phases qui les séparent [158]. Ce phénomène correspond à une transformation qualitative et quantitative des propriétés macroscopiques d'un système thermodynamique dont la variation typique de l'un des paramètres intensifs : la température, la pression, le champ électrique ou magnétique qui contrôle le système. L'exemple fondamental le plus connu de transition de phase est celui de l'eau qui passe par ces trois états : liquide, solide et gazeux. En revanche, il existe d'autres transitions de phases tels que : les transitions magnétiques, l'ordre-désordre dans les systèmes magnétiques, le mouillage magnétique, les superfluides et les supraconducteurs. Pour certaines variables thermodynamiques, les transitions de phase se produisent lorsque l'énergie libre d'un système devient non-analytique. En général, cette condition résulte de l'interaction d'un grand nombre de particules dans un système qui n'apparaît pas dans les systèmes de petites tailles.

2.1.2 Classification des transitions de phase

Les transitions de phase sont classées en deux catégories citées comme suit :

a- Classification d'Ehrenfest

La classification des transitions de phase a été faite pour la première fois par Ehrenfest selon le degré de non-analyticité de l'énergie ou la continuité des dérivées d'ordre de l'énergie libre. Ehrenfest distingua deux types de transitions de phase : transitions du premier ordre et du second ordre [159].

*** Transitions du premier ordre**

Une transition de phase est du premier ordre lorsqu'elle présente une discontinuité dans la dérivée première de l'énergie libre par rapport à une variable thermodynamique. Par

exemple : les transitions entre les trois états standards (solide, liquide, gaz) sont des transitions de phase du premier ordre puisque la dérivée première de l'énergie libre par rapport au potentiel chimique est discontinue [158].

*** Transitions du second ordre**

Une transition de phase est du second ordre lorsqu'elle détermine une discontinuité dans la dérivée seconde de l'énergie libre mais la dérivée première est en revanche continue donc le passage d'une phase à une autre se fait de façon continue. Par exemple : la transition de phase entre l'état ferromagnétique et l'état paramagnétique. La classification d'Ehrenfest généralise la définition des transitions multi-critiques d'ordre supérieur [158] car cette classification permet de mettre en exergue les différences et les ressemblances entre diverses transitions.

b- Classification de Landau

En 1937, Landau a remarqué que la transition de phase peut s'accompagner d'un changement de la symétrie du système en absence de la chaleur latente comme dans le cas de la classification d'Ehrenfest. Alors, il a proposé deux types de transitions de phase :

*** Transitions sans paramètre d'ordre**

Dans ce type de transition, le paramètre d'ordre est discontinu et les groupes de symétrie des deux phases ordonnée et désordonnée sont séparés [157]. Alors ces transitions sont toujours du premier ordre selon Ehrenfest.

*** Transitions avec paramètre d'ordre**

Lors de ces transitions, si le paramètre d'ordre est discontinu cette transition est au premier ordre et elle est du second ordre si le paramètre d'ordre est continu à la transition [157]. Dans ce cas, le groupe de symétrie de la phase ordonnée est inclus dans le groupe de symétrie de la phase désordonnée. Le formalisme de Landau définit un pseudo-paramètre d'ordre vu la difficulté de déterminer le paramètre d'ordre pour les transitions sans changement de symétrie.

2.1.3 Phénomène du mouillage magnétique

Les phénomènes de mouillage ont été étudiés intensivement par Pierre-Gilles de Gennes. Ce scientifique a proposé des idées élégantes et des pensées innovantes : ses articles sont d'une clarté limpide, dégageant des idées essentielles avec un strict minimum de formalisme. Ses premiers travaux sur le magnétisme et la supraconductivité s'inscrivaient dans une actualité brûlante, mais dès 1970 il s'engage dans des voies beaucoup plus inattendues, dans une physique classique qui n'est plus guère de mode à l'époque. C'est d'abord l'hydrodynamique, puis les cristaux liquides où il fait renaître les travaux anciens de Georges Friedel, les polymères, qui lui vaudront le prix Nobel en 1991. Il reprend le problème du mouillage qui n'avait guère évolué depuis les travaux de Thomas Young au début du XIXe siècle. À chaque fois il introduit des concepts nouveaux qui renouvellent le sujet, apportent un éclairage différent et suggèrent développements et applications.

L'étude de l'adhésion de surfaces souples liquides emprunte une grande partie de son formalisme à celui de la physique du mouillage. L'effet lié à la présence d'une monocouche de molécules tensioactives à l'interface sur le phénomène de mouillage. Tandis que, la dynamique de mouillage induite par des interactions électrostatiques a été étudiée par Bernard *et al.* [160] en microscopie d'ondes évanescentes.

L'observation d'un phénomène de mouillage nécessite de travailler avec des objets de diamètre assez important pour pouvoir effectuer une mesure optique de l'angle de contact [161]. De plus, l'intensité de la couche de mouillage s'accroît au fur et à mesure que le champ magnétique augmente. Le comportement observé semble être corrélé aux dépendances en champ magnétique du temps de capture des porteurs par les boîtes quantiques et du temps de recombinaison radiatif des excitons dans la couche de mouillage. Alors qu'une croissance de quelques monocouches crée un film mince que l'on appelle couche de mouillage (Wetting layer WL).

La couche de mouillage sur l'intensité liée à l'ensemble des points quantiques augmentait de manière non linéaire en fonction du champ magnétique. Ce comportement est qualitativement cohérent avec la dépendance du rayon de l'orbite du cyclotron 2D (dans la couche de

mouillage) avec le champ magnétique et de son influence sur la probabilité de capture des porteurs par les points quantiques. Une analyse plus développée du comportement du temps de vie radiatif avec le champ magnétique semble néanmoins nécessaire pour comprendre réellement le phénomène.

2.1.4 Phénomène de l'ordre et le désordre

Des physiciens ont réalisé pour la première fois un système magnétique où l'ordre et le désordre sont superposés au point que chaque aimant élémentaire se trouve à la fois dans la phase ordonnée et dans la phase désordonnée.

Dans de rares situations, la matière peut se trouver dans un état à la fois ordonné comme un solide cristallin et désordonné comme un verre. C'est par exemple le cas de l'état super-solide où coexistent un solide et un superfluide. Toutefois, malgré la nature quantique de cet état, ordre et désordre ne sont pas superposés. Comme dans un alliage, ils ne font que coexister, chaque atome contribuant soit à l'une soit à l'autre des phases.

Depuis les années 1970, différents types de désordres ou de perturbations ont été envisagés afin de comprendre pourquoi dans certaines situations, un nouveau comportement critique émerge alors que dans d'autres, le comportement critique demeure inchangé [162]. Afin de mettre en évidence ce phénomène, dans certaines expériences, des impuretés non magnétiques sont introduites de façon contrôlée [163]. L'influence du désordre trempé sur les transitions de phase à 2 dimensions a été abondamment étudiée dans les dernières années avec différentes méthodes. Ainsi, des prévisions analytiques [164-172], des calculs par matrice de transfert [173-177], des simulations Monte Carlo [178-188] et des calculs de séries à haute température [189, 190] ont été menés de façon complémentaire et ont permis d'obtenir une description cohérente. Les méthodes analytiques sont cette fois moins efficaces, en particulier les calculs perturbatifs au voisinage de théories conformes sont exclus, de même que les calculs par matrice de transfert, trop lourds à mettre en œuvre. Les simulations Monte Carlo n'ont été utilisées que récemment seulement pour le désordre de site dans le cas du modèle d'Ising [191-193]. Dans le cas du désordre de liaison, aucune étude par simulation Monte Carlo n'avait été menée, même pour une transition de phase du 2nd ordre obtenue pour le

modèle relativement simple d'Ising, subsiste encore la question de savoir si les deux types de désordre trempé (désordre de site et désordre de liaison) conduisent à la même classe d'universalité.

2.2 Propriétés magnétiques

Soumises à une induction magnétique, certaines substances se mettent à produire une induction magnétique elles mêmes, dans le volume qu'elles occupent à l'extérieur. On dit qu'elles s'aimantent ou se polarisent magnétiquement. Il s'agit là d'une propriété générale de la matière. Toutefois, cette propriété ne se manifeste très visiblement que dans certains matériaux appelés matériaux magnétiques. Le spin des électrons dans une faible mesure, leur mouvement orbital autour du noyau est responsable de ce phénomène, dont l'essence même ne peut être étudiée que par la physique quantique. Toutefois, le comportement détaillé des électrons dans le processus d'aimantation est décrit plus utilement par le concept de moment magnétique atomique.

2.2.1 Température de Curie

La température est un paramètre très important qui a une grande influence sur les propriétés magnétiques d'un système. En effet, l'ordre ferromagnétique disparaît au-dessus d'une température critique T_c appelée température de Curie. L'aimantation spontanée de ces corps disparaît brutalement au delà de cette température. Pour les alliages, la température de Curie change avec la concentration des composants.

2.2.2 Coercivité

La coercivité est une propriété extrinsèque. Elle est fortement influencée par les propriétés microstructurales de la couche telles que la taille et la forme des grains, la composition et la texture. Le champ coercitif H_c : est défini comme le champ magnétique nécessaire pour annuler l'aimantation, d'autres termes, c'est le champ qui réduit l'aimantation de la rémanence vers zéro.

2.2.3 Anisotropie magnétique

L'anisotropie magnétique d'un matériau traduit le fait que son énergie libre dépend de la forme du matériau et de l'orientation de son aimantation par rapport à ses axes cristallographiques. L'orientation pour laquelle cette énergie libre est minimale (ou bien maximale) correspond à un axe de facile (ou difficile) aimantation. Il est nécessaire de connaître l'anisotropie magnétique pour le bon fonctionnement d'un dispositif.

2.3 Propriétés hystérétiques

Les matériaux magnétiques possèdent des régions uniformément aimantées, qui présentent d'une part des moments magnétiques ordonnés au sein des domaines magnétiques connus aussi comme les domaines de Weiss, dont un échantillon ferromagnétique se subdivise spontanément en petits volumes élémentaires afin de minimiser son énergie globale, et d'autre part des moments magnétiques désordonnés dans différents domaines [194-196]. Les interfaces entre ces domaines sont appelées parois des domaines magnétiques [197]. Alors que, les matériaux démagnétisés se composent de domaines ordonnés avec une aimantation totale nulle.

2.3.1 Domaines magnétiques

D'une façon plus générale, un domaine magnétique est défini comme étant une région à l'intérieur d'un matériau magnétique présentant une aimantation uniforme. Un matériau présente généralement une multitude de domaines avec diverses orientations. L'apparition des domaines magnétiques s'explique par la présence du champ démagnétisant qui a été sous estimé pendant longtemps. La minimisation de l'énergie dipolaire se fait alors par la création de domaines. C'est la mise en évidence des sauts de l'aimantation qui permet de comprendre l'existence du déplacement d'une paroi entre deux domaines d'aimantation opposée [198-200]. Bloch étudie théoriquement la structure de ces parois [201] et montre que la frontière entre deux domaines élémentaires n'est pas une transition brutale mais au contraire s'étend sur une certaine épaisseur. Mais il faudra attendre l'année 1935, avec les travaux de Landau et

Lifshitz [202], pour comprendre l'origine des domaines observés. Ils montrent alors qu'une structure en domaines est plus rentable en énergie qu'un état uniformément aimanté, notamment grâce aux domaines de fermeture.

2.3.2 Cycles d'hystérésis

L'aimantation du matériau magnétique en fonction du champ magnétique extérieur appliqué présente un cycle d'hystérésis. L'hystérésis est le cœur du comportement des matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques. Toutes les applications de moteurs électriques, de transformateurs, de l'enregistrement magnétique reposent massivement sur l'aspect particulier de l'hystérésis.

*Courbe de première aimantation

L'aimantation augmente lors de l'application d'un champ magnétique externe à un flux ferromagnétique initialement démagnétisé, dont le taux de cette augmentation dépend de plusieurs facteurs : la structure défectueuse du matériau, l'orientation de champ externe, l'amplitude de l'aimantation spontanée, l'anisotropie, la géométrie du matériau étudié. Pour les matériaux ferromagnétiques, le cycle d'hystérésis présente des comportements différents pour l'aimantation M et le champ magnétique extérieur H [195, 197].

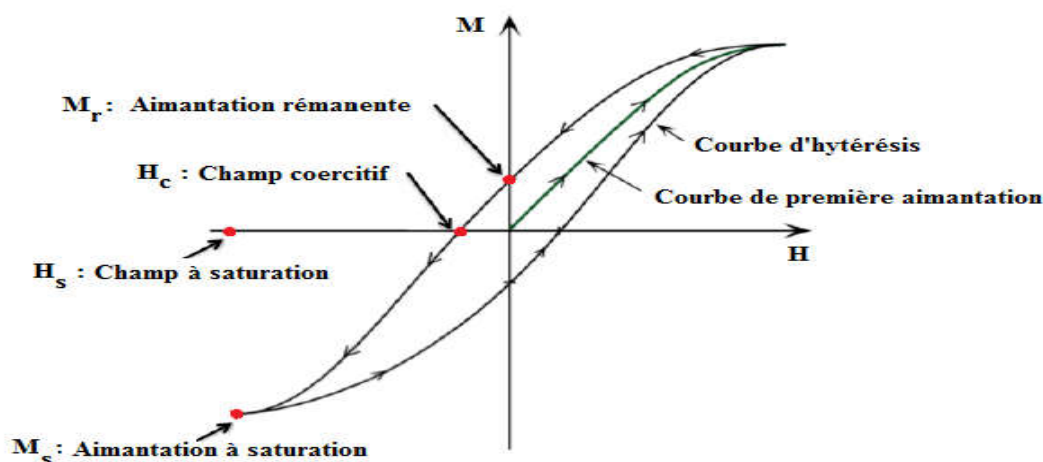


Figure II.1 : Cycle d'hystérésis d'un composé ferromagnétique traduisant le retournement des parois séparant les domaines magnétiques.

2.3.3 Paramètre caractéristiques des cycles d'hystérésis

Les matériaux magnétiques sont caractérisés par le cycle d'hystérésis comme un moyen qui procure des informations sur l'aimantation à saturation M_s qui est une propriété intrinsèque des matériaux. Ainsi deux propriétés extrinsèques qui sont l'aimantation rémanente M_r et le champ coercitif H_c dont ces deux propriétés dépendent de plusieurs facteurs extérieurs tels que la forme du matériau, la rugosité de surface, la variation du champ magnétique appliqué, les propriétés thermiques ainsi que les défauts microscopiques.

Parmi les caractéristiques des cycles d'hystérésis, on cite quatre paramètres comme suit :

*Aimantation rémanente

L'aimantation rémanente M_r est obtenue en réduisant le champ de façon monotone à zéro après la saturation. Dans ce cas, une partie des moments magnétiques reste orientée dans la direction du champ magnétique appliqué.

*Aimantation à saturation

L'aimantation à saturation M_s correspond à la valeur maximale du matériau, où tous les moments magnétiques sont parallèles au champ magnétique appliqué.

*Champ coercitif

Le champ coercitif H_c est le champ qui doit être appliqué dans le sens opposé au champ à saturation, pour réduire l'aimantation à zéro afin de démagnétiser le matériau.

*Champ à saturation

Le champ à saturation H_s correspond à la valeur minimale du champ magnétique appliqué pour lequel l'aimantation du matériau atteint sa valeur à saturation.

***Exemples de courbes d'hystérésis :**

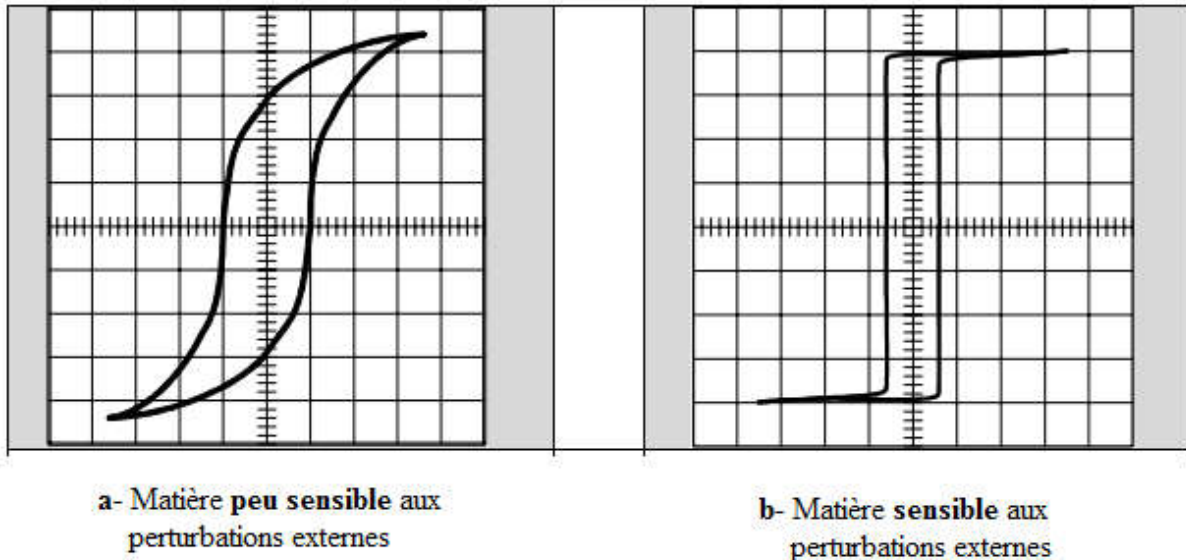


Figure II.2 : Deux types de courbes d'hystérésis.

2.3.4 Matériaux magnétiques durs et doux

Selon la forme et la largeur du cycle d'hystérésis, il existe deux types de matériaux ferromagnétiques et ferrimagnétiques. En effet, lors du tracé d'un cycle d'hystérésis d'un matériau ferromagnétique ou ferrimagnétique, une certaine quantité d'énergie est perdue sous forme de chaleur pendant le processus du mouvement des parois de domaines magnétiques [194, 203].

Ces pertes sont définies par :

$$W = \int H \cdot dM \quad (II.1)$$

Avec H est le champ magnétique appliqué et M est l'aimantation du système. Il est évident qu'elles sont proportionnelles à la surface du cycle d'hystérésis. Cela permet de distinguer : les deux types de matériaux :

* Les matériaux doux

Les matériaux magnétiques doux (soft) sont caractérisés par un cycle d'hystérésis très étroit de petite surface donc un faible champ coercitif et une aimantation rémanente importante [194, 204]. Cette aimantation peut être facilement modifiée par une excitation extérieure. Ce type de matériau est facile à magnétiser car il contient moins d'impuretés cela facilite le déplacement des parois de domines magnétiques.

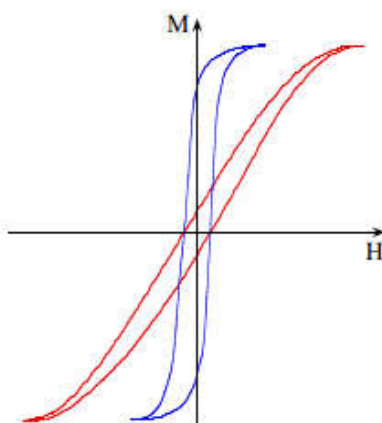


Figure II.3 : Cycle d'hystérésis d'un matériau doux.

Ces matériaux sont développés avec des applications techniques, ils sont utilisés dans les moteurs et les circuits magnétiques des transformateurs.

* Les matériaux durs

Les matériaux magnétiques durs (hard) ont le cycle d'hystérésis large et des valeurs élevées de champ coercitif et d'aimantation rémanente. Ainsi leur aimantation peut difficilement être modifiée par une excitation extérieure. Tandis que, ces matériaux sont difficiles à magnétiser et à démagnétiser [194].

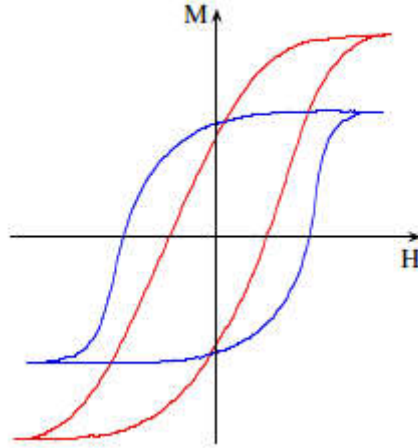
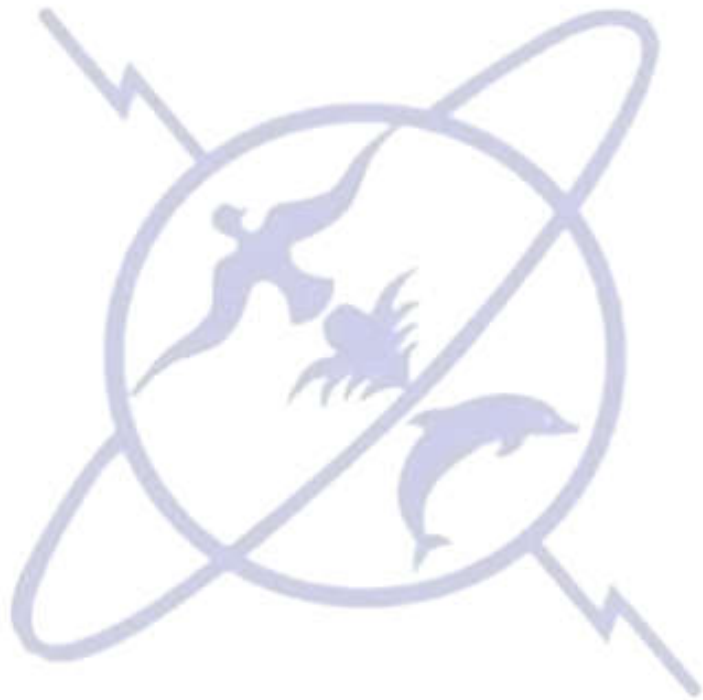
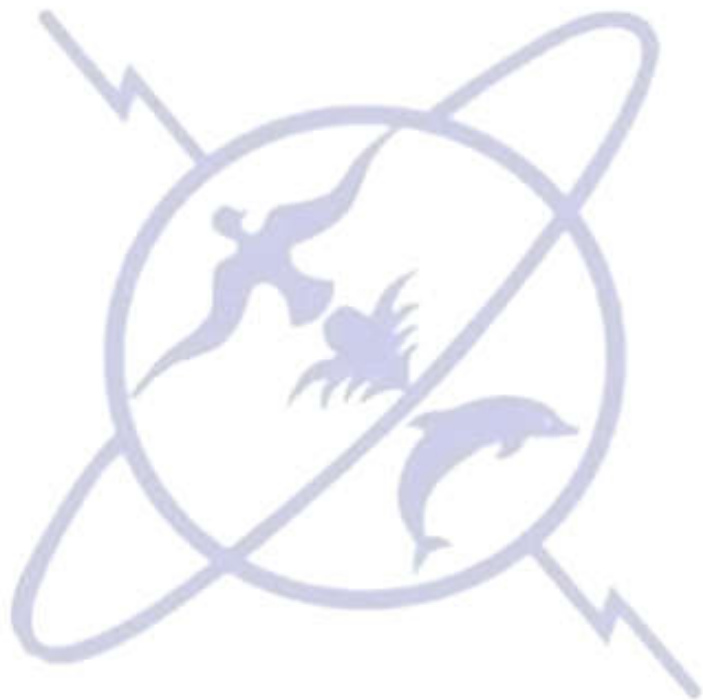


Figure II.4 : Cycle d'hystérésis d'un matériau dur.

Ces matériaux sont surtout utilisés pour la fabrication d'aimants permanents.





Chapitre 3

Etude des propriétés magnétiques des nanomatériaux Core/Shell

Les nanomatériaux ont créé un grand champ de recherche ces dernières années par vertu de leurs insolite propriétés mécaniques, électriques, optiques et magnétiques. La structuration des matériaux à l'échelle nanométrique entraîne une augmentation importante des surfaces d'échanges, ce qui induit une réactivité élevée entre le matériau et son environnement.

La morphologie ou bien l'étude des caractères formels et des structures externes de ces nanomatériaux qui compare leurs variétés, permet de distinguer de nombreuses propriétés physiques (optiques, catalytiques, mécaniques, magnétiques, thermiques, de conductivité, etc.) que ne possèdent pas les objets de plus grande taille, ainsi que des divers phénomènes.

Récemment, plusieurs chercheurs se sont concentrés sur l'étude des propriétés magnétiques des nanomatériaux [205-219]. En effet, cet intérêt est lié au fait que les nanomatériaux magnétiques revêtent une importance primordiale dans les technologies modernes et peuvent jouer un rôle majeur dans les domaines scientifiques, technologiques et industriels. Les structures nano-magnétiques ont attiré une attention considérable récemment par des recherches théoriques et expérimentales [220-226] en raison d'un large éventail de propriétés fascinantes. La structuration de la matière à l'échelle nanométrique ouvre assurément des perspectives, du fait de l'apparition de nombreuses propriétés que ne possèdent pas les objets de plus grande taille.

La nanostructure magnétique de type core/shell a suscité beaucoup d'intérêt en raison de ses propriétés physiques et chimiques qui s'appuient sur la structure du noyau (core), de la surface (shell) et des interfaces. En effet, cet intérêt inhabituel offre de nombreuses possibilités ainsi que des chances de progression et d'émergence dans plusieurs domaines scientifiques.

Dans cette partie, nous présentons les contributions traitant l'étude des phénomènes critiques ou les transitions de phase, tel que le mouillage magnétique et l'ordre et le désordre. Nous nous intéressons également aux propriétés magnétiques : la température de compensation et les cycles d'hystérésis.

3.1 Le comportement de compensation dans un nano-carré à une structure core/shell : (Article: J. of Superlattices and Microstructures, Vol. 100, (2016), 246-251, DOI: 10.1016/j.spmi.2016.09.032)

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés magnétiques d'un nano-carré constitué d'une structure core/shell. La géométrie du système étudié est formée par des couches alternées constituées de spins différents (voir Fig. III.1). Nous avons étudié l'effet des interactions d'échange de couplage et du champ cristallin. Nous avons utilisé les simulations de Monte Carlo pour étudier le comportement de cette nanostructure. Nous avons examiné également l'influence de la température sur les comportements critiques et de compensation de ce système. Des différents diagrammes de phase ont été trouvés en fonction des paramètres du système étudié. Enfin, nous avons montré que la température de compensation peut apparaître pour des valeurs spécifiques des paramètres du système.

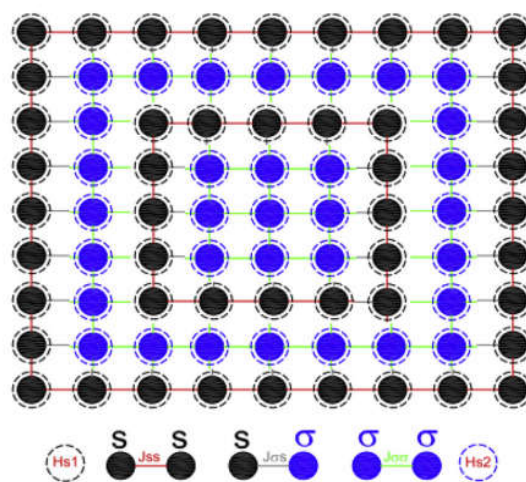


Figure III.1 : La géométrie d'un système core/shell formé par quatre couches carrées avec les spins alternés $S = 1$ et $\sigma = 3/2$.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

L'objectif de cette partie est d'étudier les diagrammes de phase de l'état fondamental dans différents plans, à l'aide des paramètres de l'Hamiltonian du système étudié, en comparant et en calculant toutes les configurations d'énergie possibles. Les diagrammes de phase de l'état fondamental correspondant au système étudié sont présentés sur les figures III.2 (a) - (d) où nous avons présenté les différentes configurations.

L'Hamiltonian qui décrit le système est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{ss} \sum_{i,j} S_i S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{k,l} \sigma_k \sigma_l - J_{s\sigma} \sum_{i,k} S_i \sigma_k - \sum_i h_i (S_i + \sigma_i) - \Delta \sum_i (S_i^2 + \sigma_i^2) \quad (\text{III.1})$$

Avec: $J_{\sigma\sigma}$ et J_{ss} déterminent la constante de couplage d'échange entre deux premiers voisins les plus proches aux couches internes et externes avec les spins $\sigma_k - \sigma_l$ et $S_i - S_j$ respectivement. $J_{s\sigma}$ est la constante d'interaction de couplage d'échange entre deux atomes magnétiques voisins les plus proches l'un de la couche externe et l'autre de la couche interne. h_i est le champ magnétique externe. Alors que Δ est le champ cristallin appliqué sur tous les S-spins.

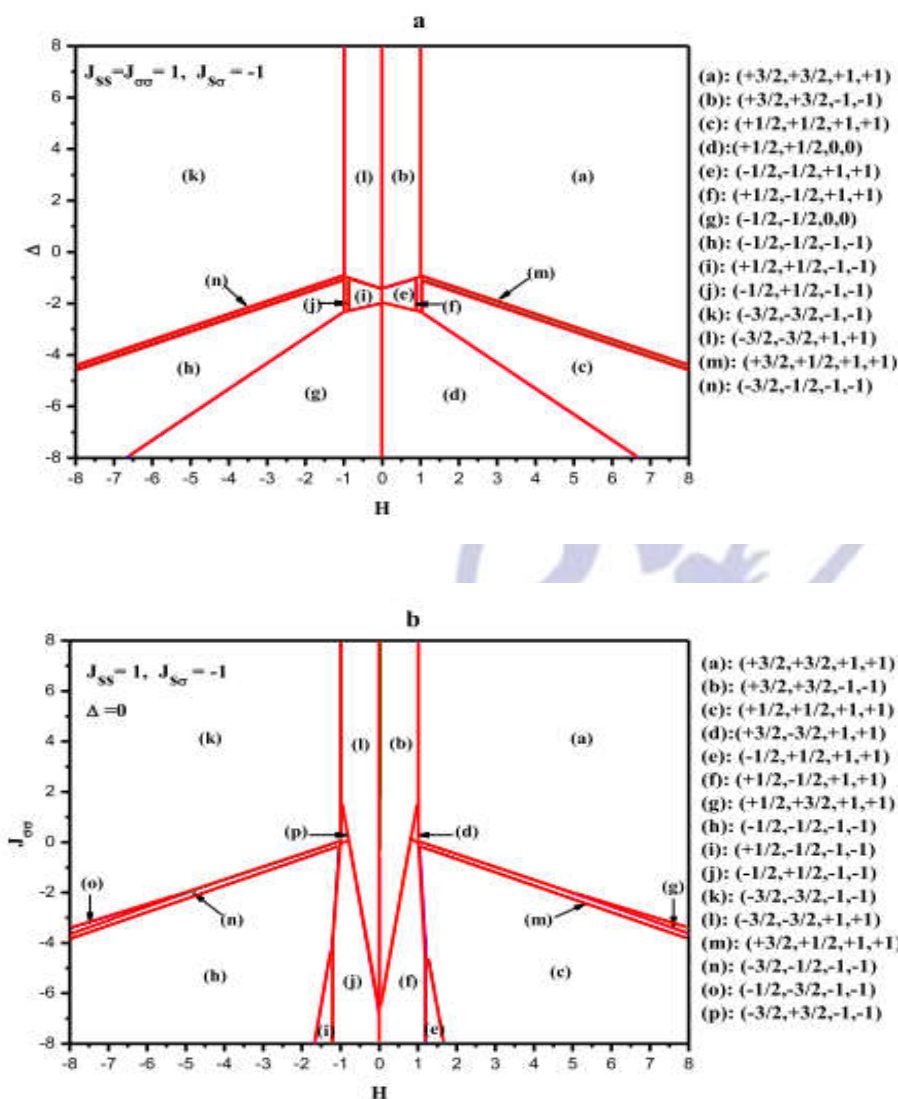
Dans le plan (H, Δ) , voir la figure III.2 (a), pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange : $J_{ss} = 1$, $J_{s\sigma} = -1$, on peut constater une symétrie parfaite par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$, toutes les phases sont trouvées pour les valeurs négatives du champ cristallin Δ où seules quatre phases sont stables pour les valeurs positives de ce paramètre.

En revanche, en absence du champ cristallin ($\Delta = 0$), pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange : $J_{ss} = 1$, $J_{s\sigma} = -1$ dans le plan $(H, J_{\sigma\sigma})$, voir la figure III.2 (b), on peut remarquer que le nombre de configurations augmente avec des régions réduites, dont on trouve la plupart des phases pour les valeurs négatives du paramètre $J_{\sigma\sigma}$, et seulement quatre phases sont trouvées pour les valeurs positives du paramètre $J_{\sigma\sigma}$, avec une symétrie parfaite par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$.

Dans le plan (H, J_{ss}) , pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange : $J_{s\sigma} = 1$ et $J_{\sigma\sigma} = -1$, on peut observer une symétrie parfaite par rapport au champ magnétique externe

par rapport à l'axe $H = 0$, en absence du champ cristallin toutes les phases possibles sont trouvées pour les valeurs négatives des interactions de couplage d'échange : J_{SS} . Alors que seules quatre phases sont trouvées pour les valeurs positives de ce paramètre, voir la figure III.2 (c).

Si on fixe les valeurs des interactions de couplage d'échange : $J_{\sigma\sigma} = 1$ et $J_{SS} = -1$ dans le plan $(H, J_{S\sigma})$, voir la figure III.2 (d), on trouve que seules deux phases sont stables pour les valeurs positives des interactions de couplage d'échange : $J_{S\sigma}$. Pour les valeurs négatives de ce paramètre, six configurations sont trouvées stables avec des régions plus larges. La symétrie parfaite par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$ dans cette figure.



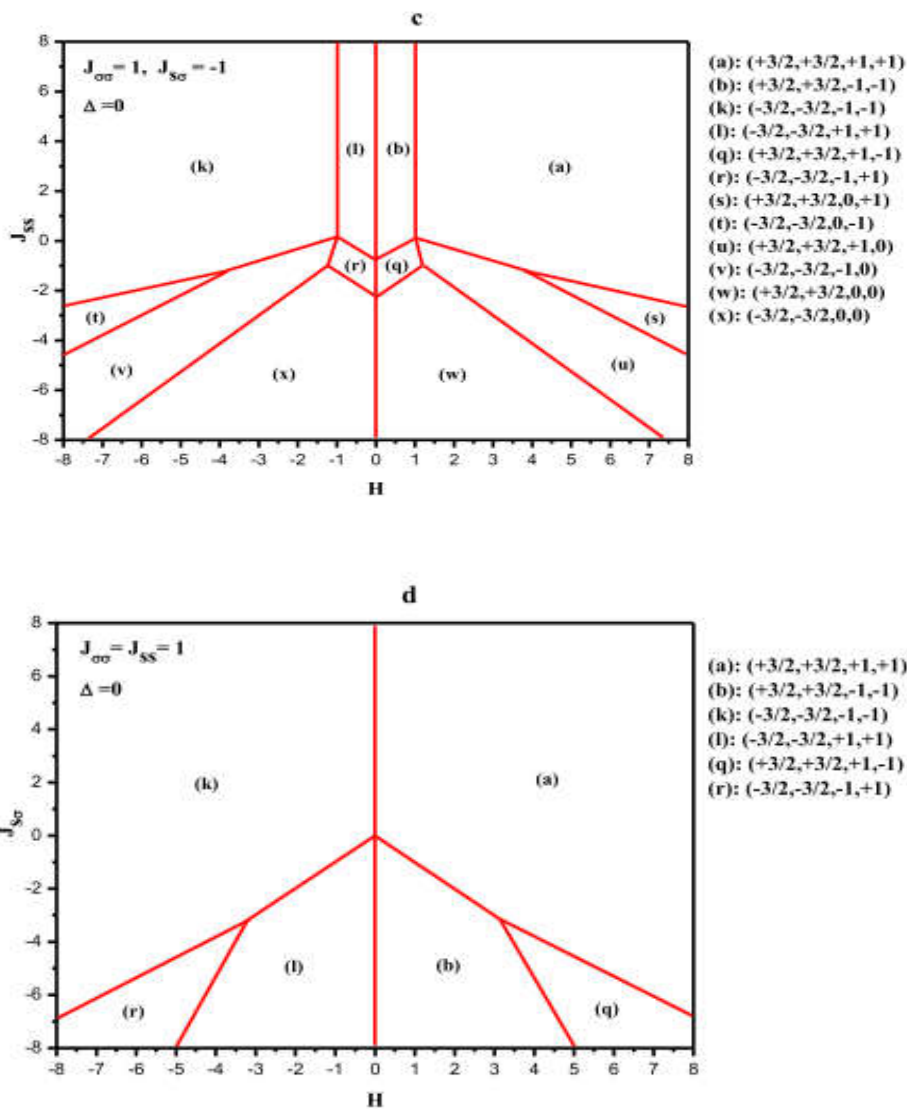


Figure III.2 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental. **(a)** Dans le plan (H, Δ) pour $J_{ss} = 1$ et $J_{\sigma\sigma} = -1$. **(b)** Dans le plan $(H, J_{\sigma\sigma})$ pour $J_{ss} = 1$, $J_{\sigma\sigma} = -1$ et $\Delta = 0$. **(c)** Dans le plan (H, J_{ss}) pour $J_{\sigma\sigma} = 1$, $J_{\sigma\sigma} = -1$ et $\Delta = 0$. **(d)** Dans le plan $(H, J_{\sigma\sigma})$ pour $J_{\sigma\sigma} = 1$, $J_{ss} = -1$ et $\Delta = 0$.

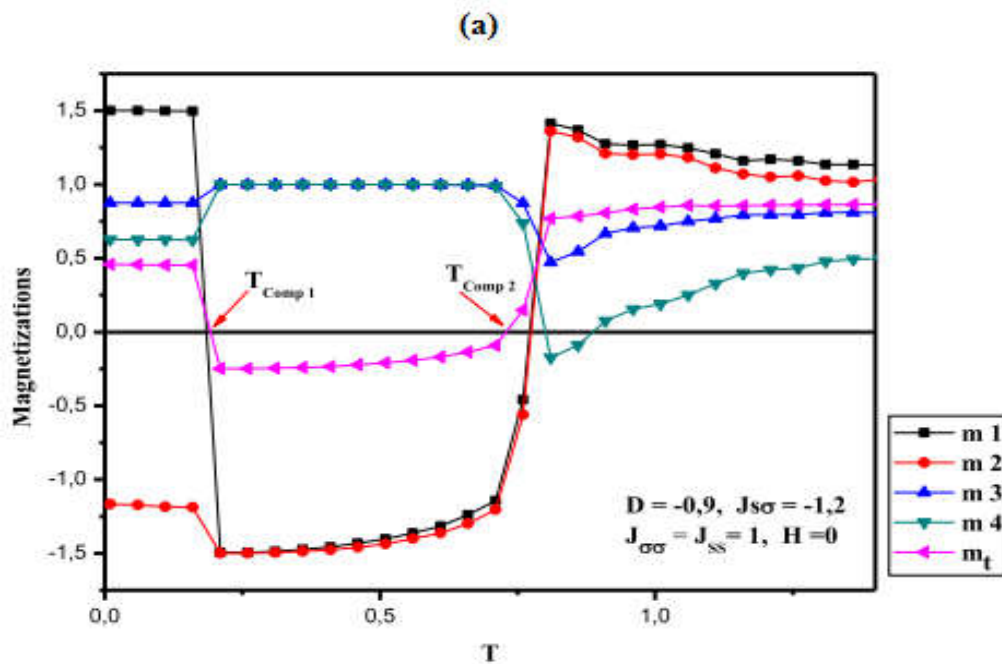
Discussions des diagrammes de phase :

D'autre part, nous nous sommes intéressés au comportement de compensation du système étudié. Pour cette fin, nous contrôlons l'existence de la température de compensation T_{comp}

pour les valeurs fixes du champ cristallin Δ et les interactions de couplage d'échange J_{SS} , en l'absence du champ magnétique externe ($H = 0$).

En effet, nous avons tracé le comportement des aimantations en fonction de la température dans les figures III.3 (a) et (b).

Dans la figure III.3 (a) deux températures de compensation sont trouvées en fonction des valeurs des paramètres du système. Alors qu'une seule température de compensation est trouvée dans la figure III.3 (b). Ainsi, le comportement de compensation du système étudié est fortement gouverné à la fois par l'effet des interactions de couplage d'échange J_{SS} et du champ cristallin Δ .



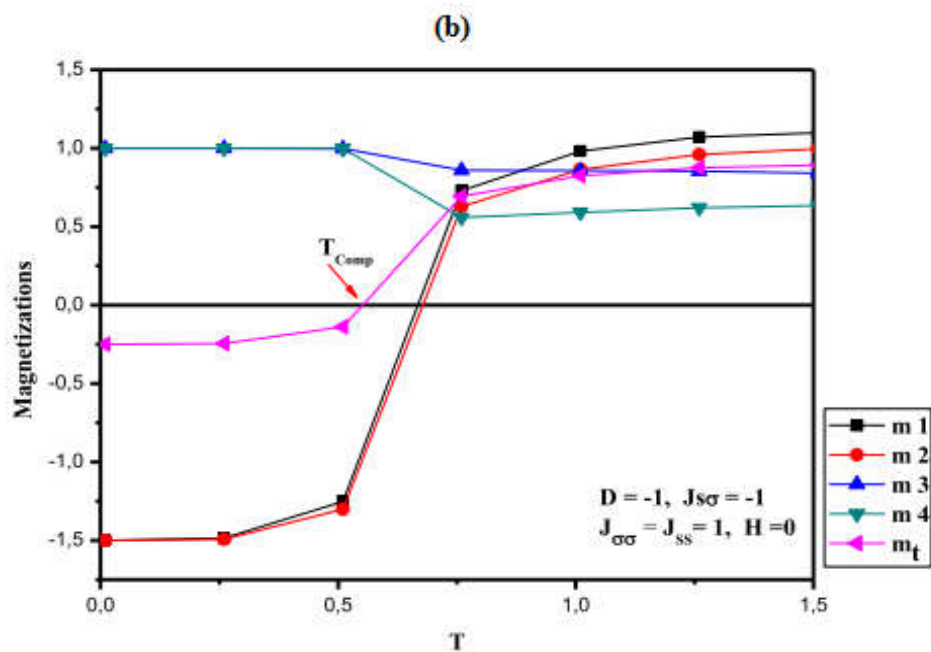


Figure III.3 : Variation de l'aimantation en fonctions des paramètres physiques: (a) Les aimantations en fonction de la température T pour : $H = 0$, $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$, $J_{s\sigma} = -1.2$ et $\Delta = -0.9$. (b) Les aimantations en fonction de la température T pour : $H = 0$, $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$, $J_{s\sigma} = -1$ et $\Delta = -1$.

3.2 Mouillage et les transitions de couches dans une structure nano-coquille :

(Article: J. of Solid State Communications, Vol. 241, (2016), 14-19, DOI:10.1016/j.ssc.2016.05.003)

Dans cette partie, les simulations de Monte Carlo ont été utilisées pour étudier les propriétés magnétiques et les cycles d'hystérésis d'une structure de nano-coquille composée de quatre bandes (voir Figure III.4). Nous avons prouvé l'influence des champs magnétiques de surface et interne qui sont responsables des phénomènes de mouillage et des transitions de couches. Le comportement des aimantations ainsi que les diagrammes de phase de l'état fondamental sont présentés dans ce travail. Nous avons également exploré l'effet du champ magnétique

externe, de la température et des interactions de couplage d'échange sur les cycles d'hystérésis.

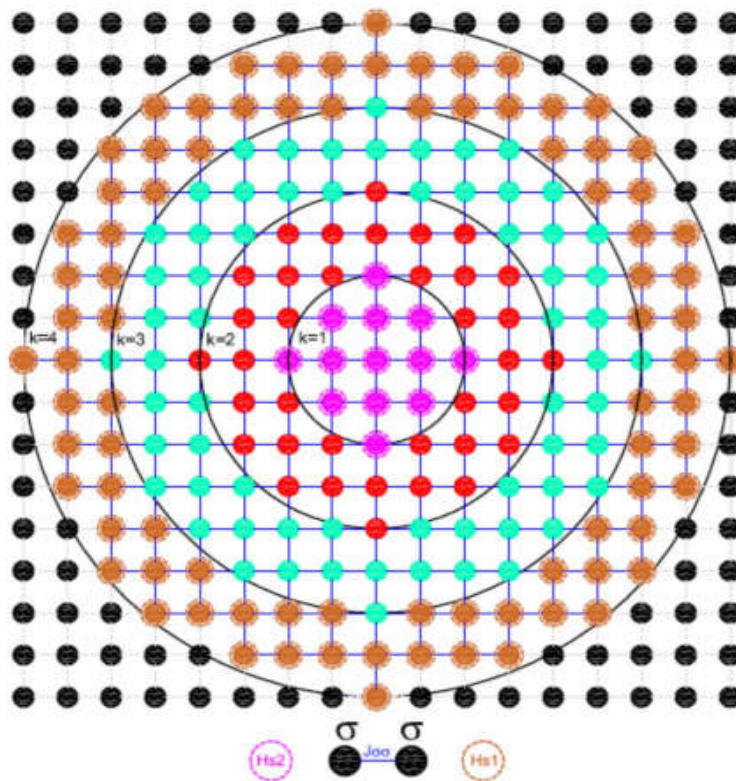


Figure III.4 : La géométrie d'une structure de nano-coquille core/shell composée de quatre bandes contenant le spin $\sigma = 1/2$.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

Pour étudier l'effet de l'absence de champ magnétique de surface ($H_{s2} = 0$) appliqué sur la couche $k = 1$, nous avons présenté dans les figures III.5 (a) - (c) les configurations stables correspondantes.

L'Hamiltonian qui décrit le système est donné par:

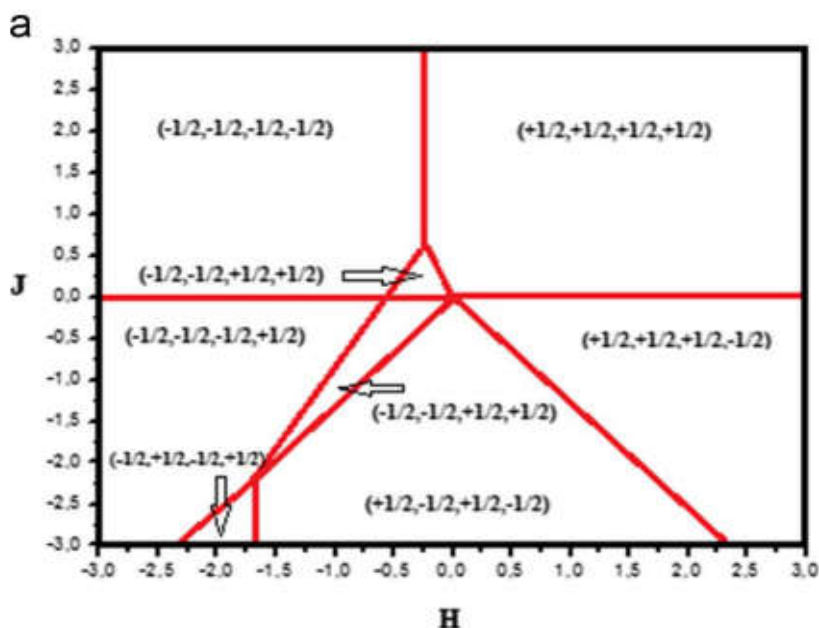
$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i \tag{III.2}$$

Avec : J détermine la constante de couplage d'échange entre deux atomes magnétiques voisins les plus proches de spin $\sigma_i - \sigma_j$, et h_i représente le champ magnétique externe.

La figure III.5 (a) tracée dans le plan (H, J) montre que huit configurations sont stables, pour une valeur fixe du champ magnétique de surface: $H_{s1} = 1$. La plus part de ces configurations sont trouvées pour les valeurs négatives de l'interaction de couplage d'échange J.

En absence du champ magnétique ($H = 0$) on trouve six configurations stables dans le plan (H_{s1}, J), la plus part de ces configurations sont trouvées pour les valeurs négatives de l'interaction de couplage d'échange J, voir la figure III.5 (b).

D'autre part, nous avons trouvé seulement quatre configurations stables dans le plan (H, H_{s2}) pour une valeur fixe de l'interaction de couplage d'échange : $J = 1$. Une symétrie brisée par rapport au point ($H_{s2} = 0 ; H = 0$) est également trouvée sur la figure III.5 (c).



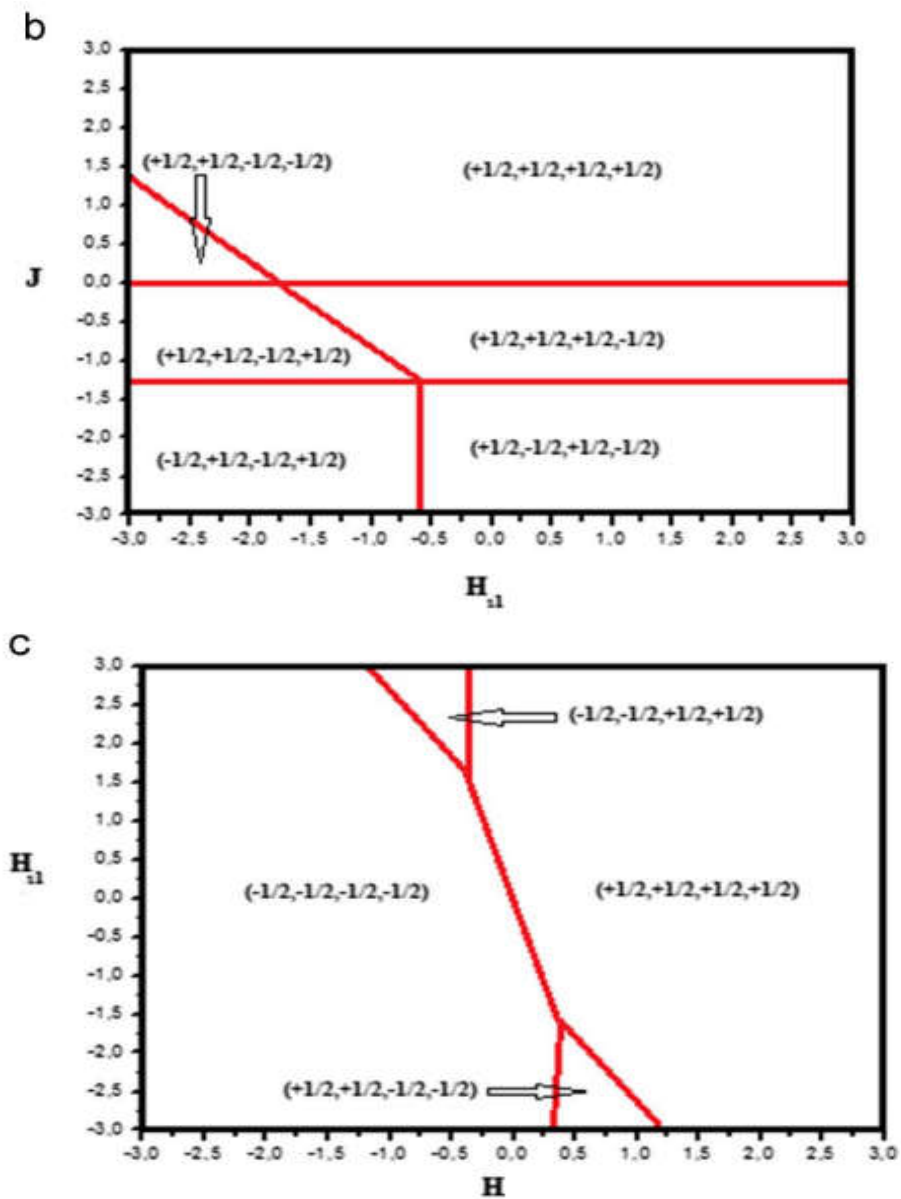


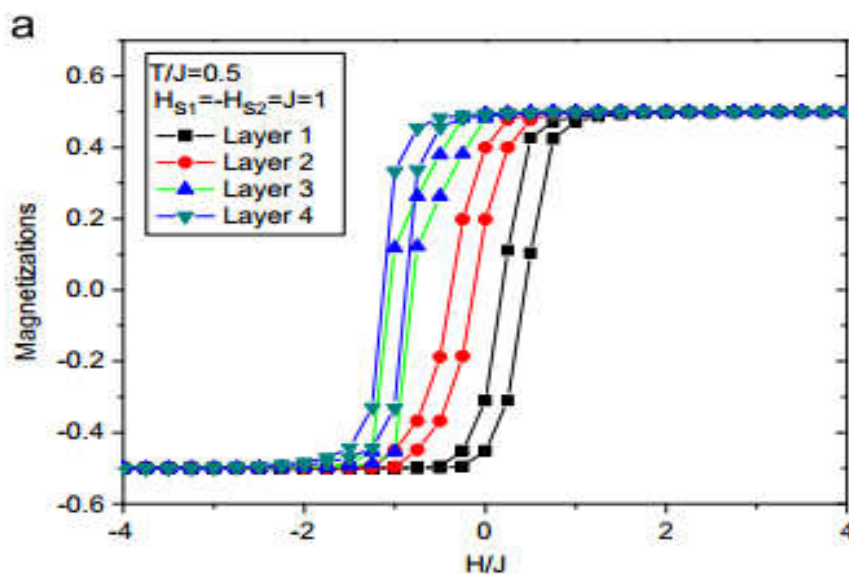
Figure III.5 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental dans le cas $H_{s2} = 0$: **(a)** Dans le plan (H, J) pour $H_{s1} = 1$. **(b)** Dans le plan (H_{s1}, J) pour $H = 0$. **(c)** Dans le plan (H, H_{s1}) pour $J = 1$.

Discussions des diagrammes de phase :

Il est bien connu que les cycles d'hystérésis peuvent nous renseigner sur la nature des matériaux étudiés : doux ou bien durs. En effet, lorsque le champ coercitif est faible, le matériau est un matériau doux, alors que ce matériau est classé comme étant dur pour de grandes valeurs du champ coercitif.

Dans ce travail, le système étudié présente des différentes valeurs de champ coercitif pour chaque couche, en fonction des valeurs des autres paramètres. Nous allons examiner les cycles d'hystérésis magnétiques pour le système étudié. A cet effet, nous montrons dans les figures III.6 (a) - (c) le comportement de chaque aimantation de couche m_k ($k = 1, 2, 3, 4$) en fonction du champ magnétique externe réduit H/J .

On fixe la valeur de la température $T/J = 0.5$ dans la figure III.6 (a) où la saturation d'aimantation de la couche $k = 4$ est atteinte avant la couche $k = 3$, la saturation d'aimantation de la couche $k = 3$ est atteinte avant celle de la couche $k = 2$, et ainsi de suite. Ceci est dû au fait que la couche externe ($k = 4$) est sous l'influence d'un champ magnétique de surface $H_{s1}/J = 1$, alors que la couche interne ($k = 1$) est sous à l'influence du champ magnétique de surface $H_{s2}/J = -1$. Les mêmes arguments sont valables pour des valeurs de température plus élevées: $T/J = 1$ (voir la figure III.6 (b)) et $T/J = 2$ (voir la figure III.6 (c)). En augmentant de plus en plus les valeurs de la température, la phase paramagnétique est atteinte et la surface des cycles d'hystérésis diminue et puis disparaît finalement.



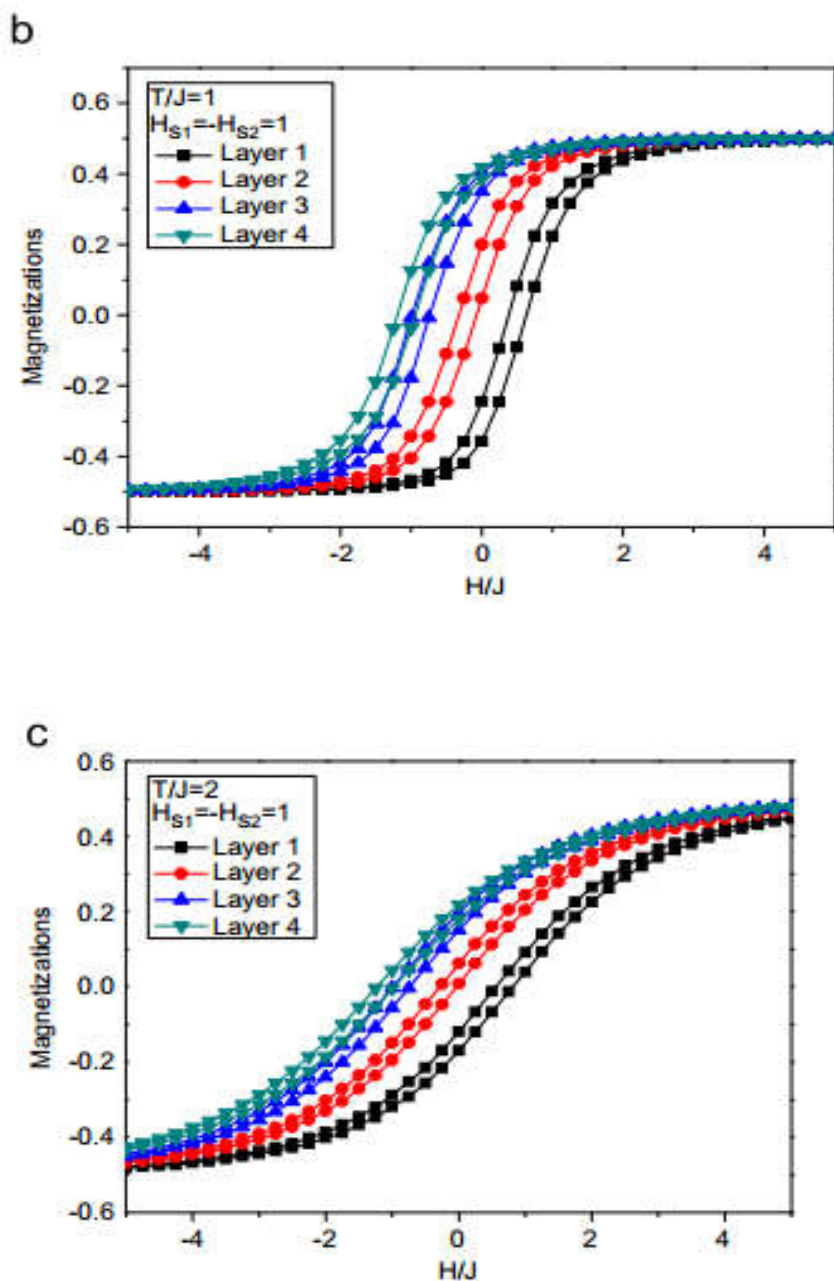


Figure III.6 : Les cycles d'hystérésis des aimantations partielles en fonction du champ magnétique H/J pour chaque couche m_k ($k = 1, 2, 3, 4$). (a) Pour $H_{S2} = -H_{S1} = 1, J = 1$ et $T/J = 0,5$. (b) Pour $H_{S2} = -H_{S1} = 1, J = 1$ et $T/J = 1$. (c) Pour $H_{S2} = -H_{S1} = 1, J = 1$ et $T/J = 2$.

3.3 Mouillage et transitions de couches dans une structure nano-hexagonale : (Article: J. of Superconductivity and Novel Magnetism, Vol. 30(2), (2016), 455-462, DOI: 10.1007/s10948-016-3712-y)

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés magnétiques dans une structure nano-hexagonale formée de quatre couches hexagonales, avec deux types de spins (voir Figure III.7). L'Hamiltonian de ce système est modélisé par des différents paramètres; les champs magnétiques interne et externe, le champ cristallin et les interactions de couplage d'échange. Dans cette étude, nous avons généré les diagrammes de phase de l'état fondamental et puis étudié les aimantations et les phénomènes de mouillage à température finie. Pour ce but, nous avons utilisé la méthode de Monte Carlo. Nous avons aussi analysé les phénomènes de mouillage et les transitions de couches apparaissant sous l'effet de différents paramètres présents dans l'Hamiltonian.

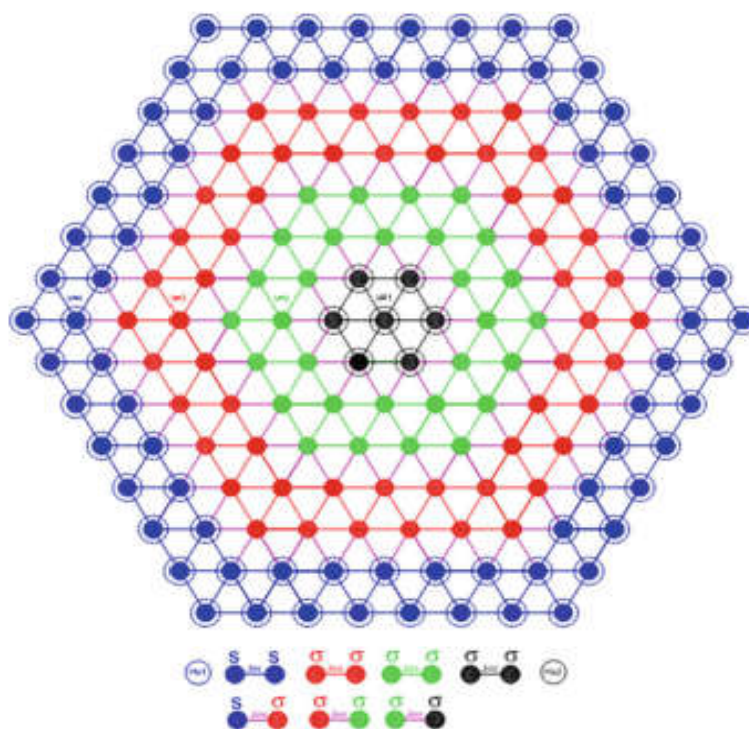


Figure III.7 : La géométrie d'une structure nano-hexagonale core/shell formée par quatre couches hexagonales, avec deux types de spins : $S = 1$ et $\sigma = 1/2$.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

Les diagrammes de phase de l'état fondamental, du système étudié, sont présentés dans cette section en comparant toutes les énergies de configuration possibles. En fait, les diagrammes de phase correspondants sont représentés sur les figures III.8 (a) - (g). Nous avons représenté, dans ces figures, les différentes configurations dans différentes régions du diagramme de phase pour les différentes couches du système étudié.

L'Hamiltonian qui décrit le système est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{ss} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} \sigma_k \sigma_l - J_{s\sigma} \sum_{\langle i,k \rangle} S_i \sigma_k - \sum_i h_i (S_i + \sigma_i) - D \sum_i S_i^2 \quad (\text{III.3})$$

Où: $J_{\sigma\sigma}$ et J_{ss} déterminent la constante de couplage d'échange entre deux premiers voisins les plus proches de spin $\sigma_k - \sigma_l$ et $S_i - S_j$ aux couches internes et externes, respectivement. $J_{s\sigma}$ est la constante d'interaction de couplage d'échange entre deux atomes magnétiques voisins les plus proches l'un de la couche externe et l'autre de la couche interne. Le champ cristallin D est appliqué sur tous les S -spins. Ainsi que h_i détermine le champ magnétique externe.

Dans la figure III.8 (a), une symétrie parfaite par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$ dans le plan (H, D) pour les valeurs fixes d'interactions de couplage d'échange : $J_{ss} = J_{s\sigma} = J_{\sigma\sigma} = 1$. Dans plus de $2 \times 2 \times 2 \times 3 = 24$ configurations, seules deux configurations sont stables dans ce diagramme de phase, voir la figure III.8 (a).

En absence du champ cristallin ($D = 0$) on fixe les valeurs d'interactions de couplage d'échange : $J_{ss} = J_{s\sigma} = 1$ dans le plan $(H, J_{\sigma\sigma})$. Nous avons trouvé six configurations stables où la plus part de ces configurations sont trouvées pour les valeurs d'interaction de couplage d'échange : $J_{\sigma\sigma} < 1$, voir la figure III.8 (b).

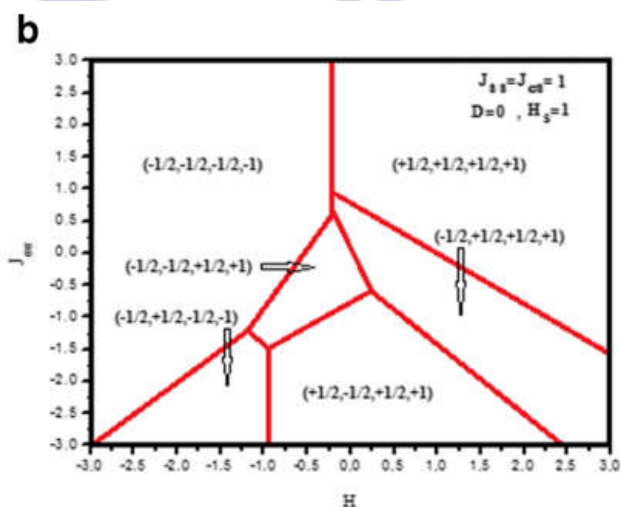
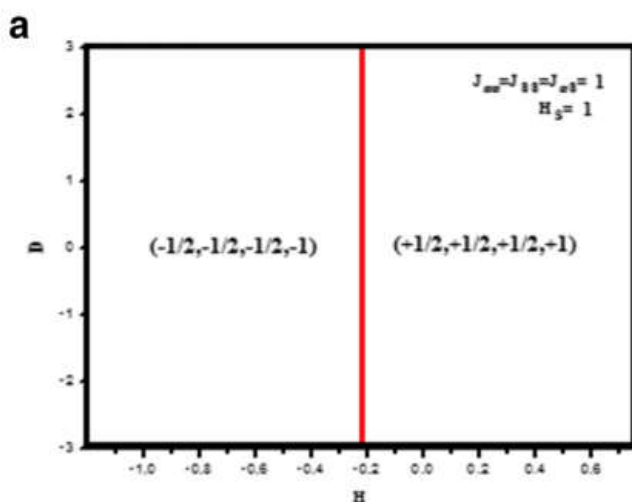
Dans le plan $(H, J_{s\sigma})$ on fixe les valeurs d'interactions de couplage d'échange : $J_{ss} = J_{\sigma\sigma} = 1$ en absence du champ cristallin. Nous avons trouvé quatre configurations stables, ainsi qu'une symétrie parfaite par rapport au paramètre d'interaction de couplage d'échange par rapport à l'axe $J_{s\sigma} = 0$ dans la figure III.8 (c).

Dans le plan $(J_{S\sigma}, J_{\sigma\sigma})$ nous examinons l'effet des interactions de couplage d'échange en fixant le paramètre d'interaction de couplage d'échange $J_{SS} = 1$. En absence du champ magnétique externe et du champ cristallin ($H = D = 0$), deux symétries parfaites sont trouvées par rapport aux paramètres : $J_{S\sigma}$ et $J_{\sigma\sigma}$ par rapport aux axes $J_{S\sigma} = 0$ et $J_{\sigma\sigma} = 0$ dont six configurations sont trouvées stables dans la figure III.8 (d). Seulement quatre configurations sont stables pour les valeurs négatives du paramètre : $J_{\sigma\sigma}$.

Dans la figure III.8 (e) on fixe le paramètre d'interaction de couplage d'échange $J_{S\sigma} = 1$, en absence du champ magnétique externe, et du champ cristallin. Nous avons trouvé six configurations sont trouvées stables, seules quatre configurations sont stables pour les valeurs négatives de ce paramètre $J_{\sigma\sigma}$.

En absence du champ cristallin, on fixe les valeurs d'interactions de couplage d'échange : $J_{\sigma\sigma} = J_{S\sigma} = 1$ dans le plan (H, J_{SS}) . Nous avons trouvé quatre configurations stables dans la figure III.8 (f).

Dans le plan $(D, J_{\sigma\sigma})$ nous avons trouvé trois configurations stables en absence du champ magnétique externe pour des valeurs fixes d'interactions de couplage d'échange : $J_{SS} = J_{S\sigma} = 1$. Deux configurations sont stables pour les valeurs négatives de ce paramètre $J_{\sigma\sigma}$, voir la figure III.8 (g).



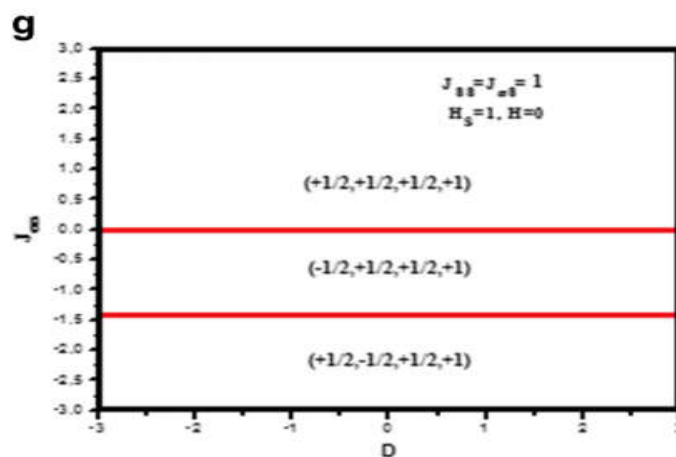
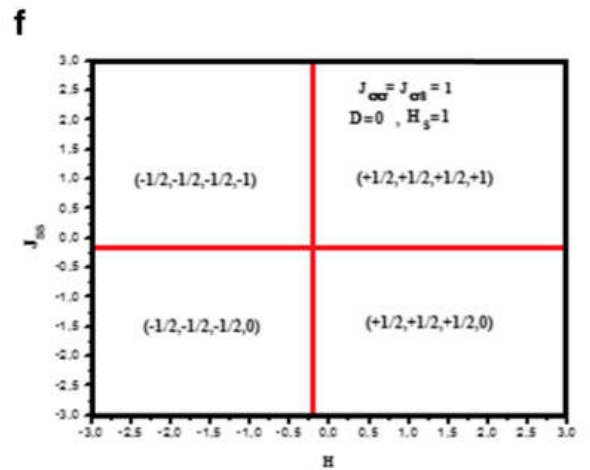
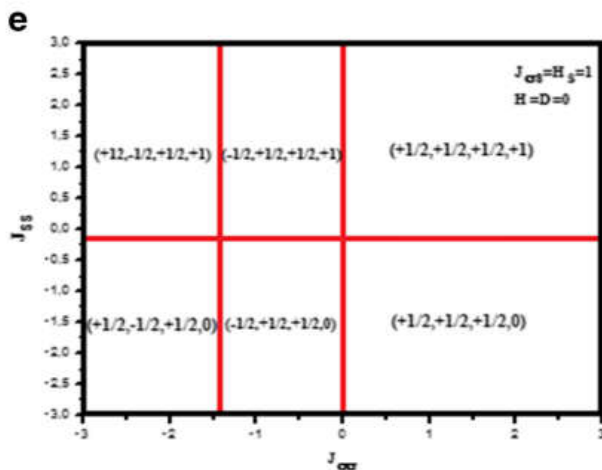
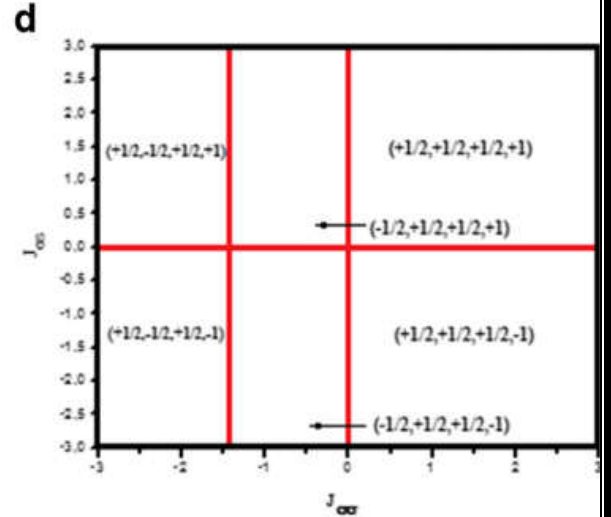
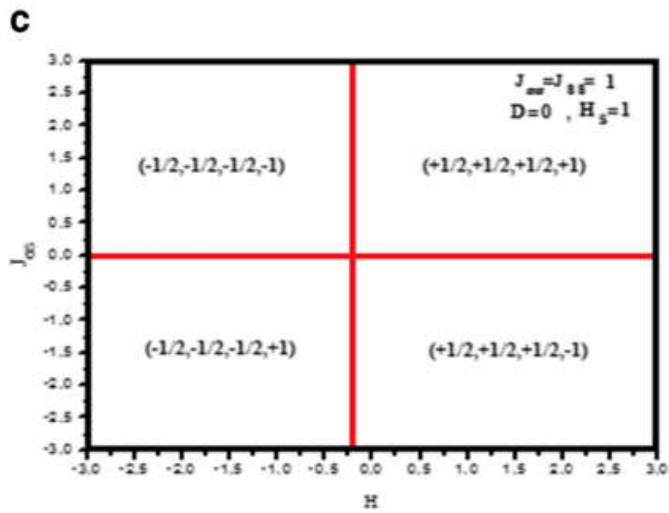


Figure III.8 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental, avec $H_{s2} = -H_{s1} \neq 0$: **(a)** Dans le plan (H, D) pour $J_{ss} = J_{s\sigma} = J_{\sigma\sigma} = 1$. **(b)** Dans le plan $(H, J_{\sigma\sigma})$ pour $J_{ss} = J_{s\sigma} = 1$ et $D = 0$. **(c)** Dans le plan $(H, J_{s\sigma})$ pour $J_{ss} = 1, J_{\sigma\sigma} = -1$ et $D = 0$. **(d)** Dans le plan $(J_{s\sigma}, J_{\sigma\sigma})$ pour $J_{ss} = 1$ et $H = D = 0$. **(e)** Dans le plan $(J_{ss}, J_{\sigma\sigma})$ pour $J_{s\sigma} = 1$ et $H = D = 0$. **(f)** Dans le plan (H, J_{ss}) pour $J_{\sigma\sigma} = J_{s\sigma} = 1$ et $D = 0$. **(g)** Dans le plan $(D, J_{\sigma\sigma})$ pour $J_{ss} = J_{s\sigma} = 1$ et $H = 0$.

Discussions des diagrammes de phase :

Sur les figures III.9(a) - (c), en l'absence du champ cristallin ($D = 0$) et pour des valeurs sélectionnées de la température nous examinons le comportement des aimantations pour chaque couche en fonction du champ magnétique externe réduit $H/J_{\sigma\sigma}$, on trace sur ces figures l'aimantation de chaque couche m_k ($k = 1, 2, 3, 4$), pour des valeurs fixes des interactions de couplages d'échange $J_{ss} = J_{\sigma\sigma} = J_{s\sigma} = 1$, ainsi que pour une valeur fixe du champ magnétique de surface réduit $H_s/J_{\sigma\sigma} = 1$.

En effet, la figure III.9 (a) correspond à une basse valeur de la température $T/J_{\sigma\sigma} = 1$, montrant le comportement des aimantations de chaque couche: m_1, m_2, m_3 et m_4 . On constate que les transitions d'aimantation sont toutes de type du premier ordre. En augmentant la température à la valeur $T/J_{\sigma\sigma} = 1.5$ (voir la figure III.9 (b)), les transitions des aimantations : m_1 et m_2 sont de type du second ordre, alors que les transitions des aimantations : m_3 et m_4 sont de type du premier ordre. La figure III.9 (c) correspond à une valeur de température $T/J_{\sigma\sigma} = 3$, seule l'aimantation m_4 subit un type de transition du premier ordre tandis que les aimantations m_1, m_2 et m_3 conservent la transition de phase du second ordre.

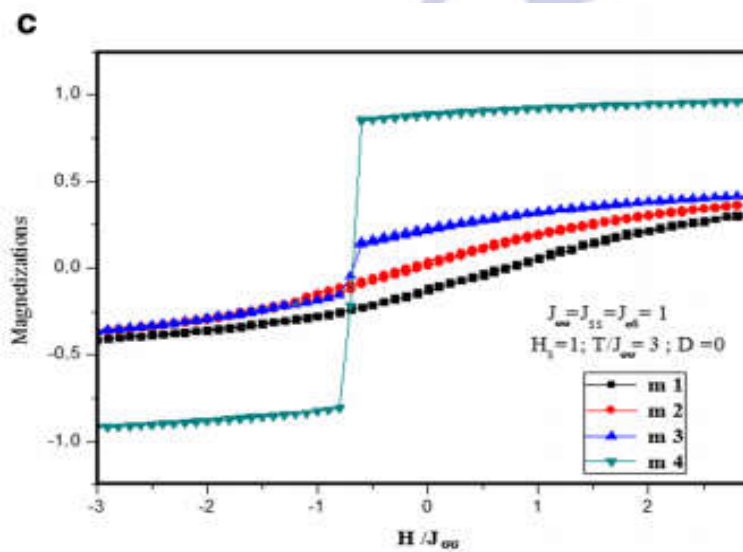
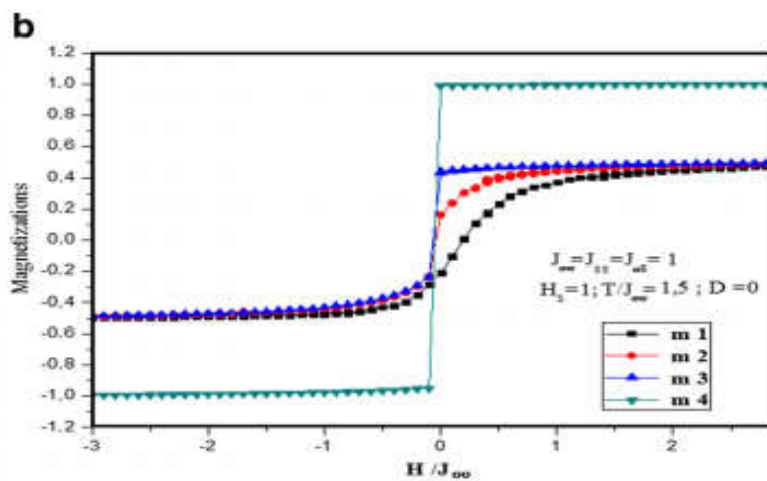
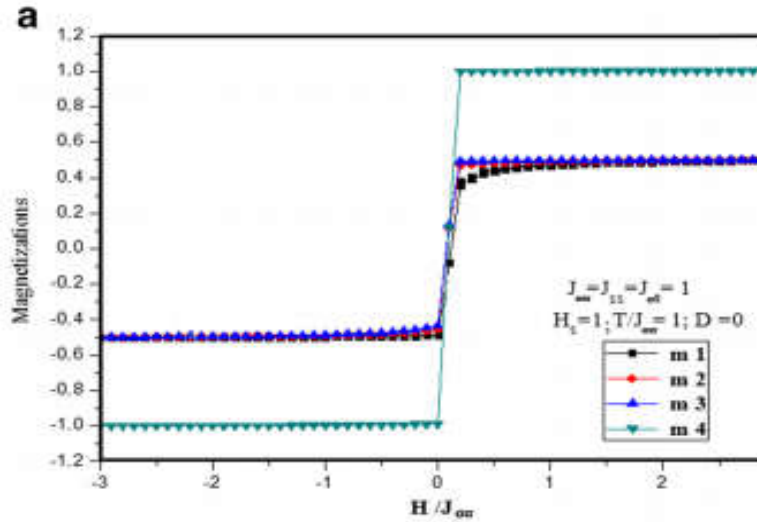


Figure III.9 : Les cycles d'hystérésis des aimantations en fonction du champ magnétique $H/J_{\sigma\sigma}$ pour chaque couche m_k ($k = 1, 2, 3, 4$) : **(a)** Pour $H_s/J_{\sigma\sigma} = 1, T/J_{\sigma\sigma} = 1$ avec $J_{ss} = J_{\sigma\sigma} = J_{s\sigma} = 1$ et $D = 0$. **(b)** Pour $H_s/J_{\sigma\sigma} = 1, T/J_{\sigma\sigma} = 1.5$ avec $J_{ss} = J_{\sigma\sigma} = J_{s\sigma} = 1$ et $D = 0$. **(c)** Pour $H_s/J_{\sigma\sigma} = 1, T/J_{\sigma\sigma} = 3$ avec $J_{ss} = J_{\sigma\sigma} = J_{s\sigma} = 1$ et $D = 0$.

3.4 Propriétés magnétiques dans une nanostructure polymère

core/shell : (Article: J. of Solid State Communications, Vol. 267, (2017), 57-62, DOI: 10.1016/j.ssc.2017.09.020)

Dans ce présent travail, nous avons étudié les propriétés magnétiques des nano-systèmes core/shell de type polymères (voir Figure III.10). En fait, nous avons étudié les effets du champ magnétique externe, l'effet de l'anisotropie cristalline, le couplage d'interaction et la température afin d'explicitier les propriétés magnétiques de ces nanostructures polymères. D'autre part, nous avons examiné l'existence de la température de compensation induite par la présence de la structure core/shell. Tout d'abord, nous avons présenté les diagrammes de phase de l'état fondamental, dans différents plans des paramètres physiques. D'autre part, nous avons appliqué les simulations de Monte Carlo, pour une valeur de température non nulle, afin d'étudier le comportement thermique de ces nano-systèmes. Pour compléter cette étude, nous avons étudié l'effet de l'anisotropie cristalline sur les aimantations partielles et totales.

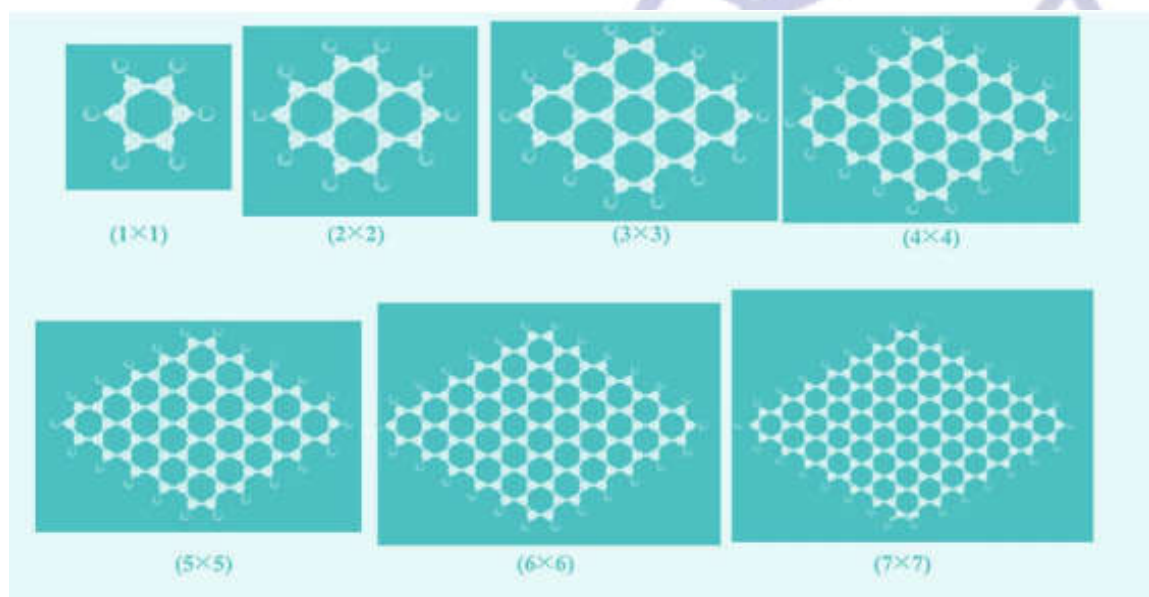


Figure III.10 : Les systèmes étudiés formés par sept géométries core/shell avec deux types de spins : $S = 1$ et $\sigma = 1/2$.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

En calculant et en comparant toutes les configurations possibles ($2 \times 3 = 6$) pour explorer les différents diagrammes de phase. Nous examinons les diagrammes de phase dans différents plans, tracés pour les paramètres physiques du système étudié. Les diagrammes de phase de l'état fondamental correspondants sont présentés sur les figures III.11 (a) - (h).

L'Hamiltonian qui décrit le système est donné par :

$$\mathcal{H} = -J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_{ss} \sum_{\langle k,l \rangle} S_k S_l - J_{s\sigma} \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i S_k - H \sum_i (S_i + \sigma_i) - D \sum_i S_i^2 \quad (III.4)$$

Où: $J_{\sigma\sigma}$ et J_{ss} déterminent la constante de couplage d'échange entre deux premiers voisins les plus proches de spin $\sigma_i - \sigma_j$ et $S_k - S_l$ aux couches internes et externes, respectivement. $J_{s\sigma}$ est la constante d'interaction de couplage d'échange entre deux atomes magnétiques voisins les plus proches l'un de la couche externe et l'autre de la couche interne. Le champ cristallin D est appliqué seulement sur tous les spins ($S=1$). Ainsi que H détermine le champ magnétique externe.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

En l'absence du champ magnétique externe et du champ cristallin ($H = D = 0$), on présente sur la figure III.11 (a), correspondant au plan ($J_{\sigma\sigma}, J_{s\sigma}$), on fixe la valeur de l'interaction de couplage d'échange: $J_{ss} = 1$ pour tracer les diagrammes de l'état fondamental. En fait, une symétrie parfaite est trouvée en ce qui concerne l'interaction de couplage d'échange $J_{s\sigma}$ par rapport à l'axe $J_{s\sigma} = 0$. Nous n'avons trouvé que deux phases stables occupant des grandes régions sur la figure III.11 (a).

La figure III.11 (b) est tracée dans le plan ($J_{ss}, J_{s\sigma}$) pour une valeur fixe de l'interaction de couplage d'échange : $J_{\sigma\sigma} = 1$ et en absence à la fois du champ magnétique externe et du champ cristallin ($H = D = 0$). Nous n'avons trouvé que quatre phases stables occupant des

grandes régions pour les valeurs négatives de l'interaction de couplage d'échange : $J_{\sigma\sigma}$. En revanche, seules deux phases sont stables pour les valeurs positives de ce paramètre.

Afin d'étudier les configurations les plus stables dans le plan $(H, J_{\sigma\sigma})$, pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{ss} = 1$ et $J_{\sigma\sigma} = -0.15$, nous avons tracé les configurations stables sur la figure III.11 (c). En fait, une symétrie parfaite est trouvée, en ce qui concerne le champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$ tel qu'il est illustré sur la figure III.11 (c) en absence du champ cristallin. Le nombre de configurations stables est réduit et occupe de grandes régions. En fait, seulement quatre configurations sont stables sur cette figure.

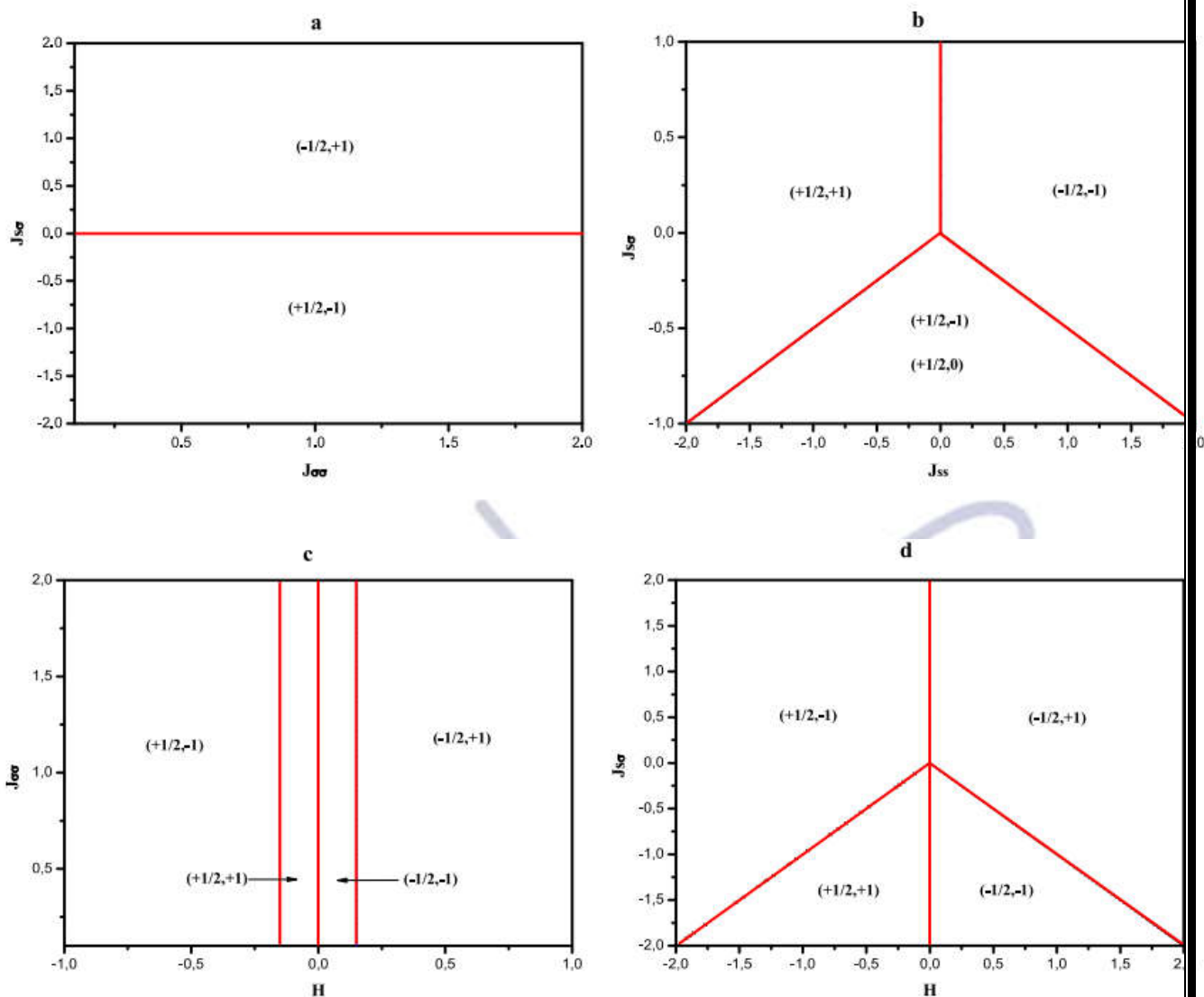
D'autre part, on trouve une symétrie parfaite, en ce qui concerne le champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$ dans le plan $(H, J_{\sigma\sigma})$ pour les valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et en absence du champ cristallin. La figure correspondante montre que seules quatre phases sont stables pour les valeurs négatives de l'interaction de couplage d'échange : $J_{\sigma\sigma}$ et que seules deux phases sont stables pour les valeurs positives de ce paramètre, voir la figure III.11 (d).

Dans le plan $(D, J_{\sigma\sigma})$ pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{ss} = 1$, $J_{\sigma\sigma} = -0.15$ et en l'absence du champ magnétique externe, quelques nouvelles phases se produisent dans ce plan. En effet, deux phases se retrouvent simultanément dans la même région, voir la figure III.11 (e).

Suivant la même motivation, en absence du champ magnétique externe, on trace la figure III.11 (f) correspondante dans le plan $(D, J_{\sigma\sigma})$, les configurations stables pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$. En effet, deux phases sont trouvées stables pour les valeurs négatives du champ cristallin D . Alors que deux autres phases se sont révélées stables pour les valeurs positives de ce paramètre.

Afin d'inspecter l'effet du champ externe et du champ cristallin, nous tracerons dans le plan (H, D) les diagrammes de phase correspondants pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et $J_{\sigma\sigma} = -0.15$. En fait, à partir de la figure III.11 (h), on

peut observer une symétrie parfaite en ce qui concerne le champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$. Toutes les phases possibles sont trouvées sur cette figure pour les valeurs négatives du champ cristallin D , où seules quatre phases sont stables pour les valeurs positives de ce paramètre.



CENTRE D'ETUDES DOCTORALES - SCIENCES ET TECHNOLOGIES

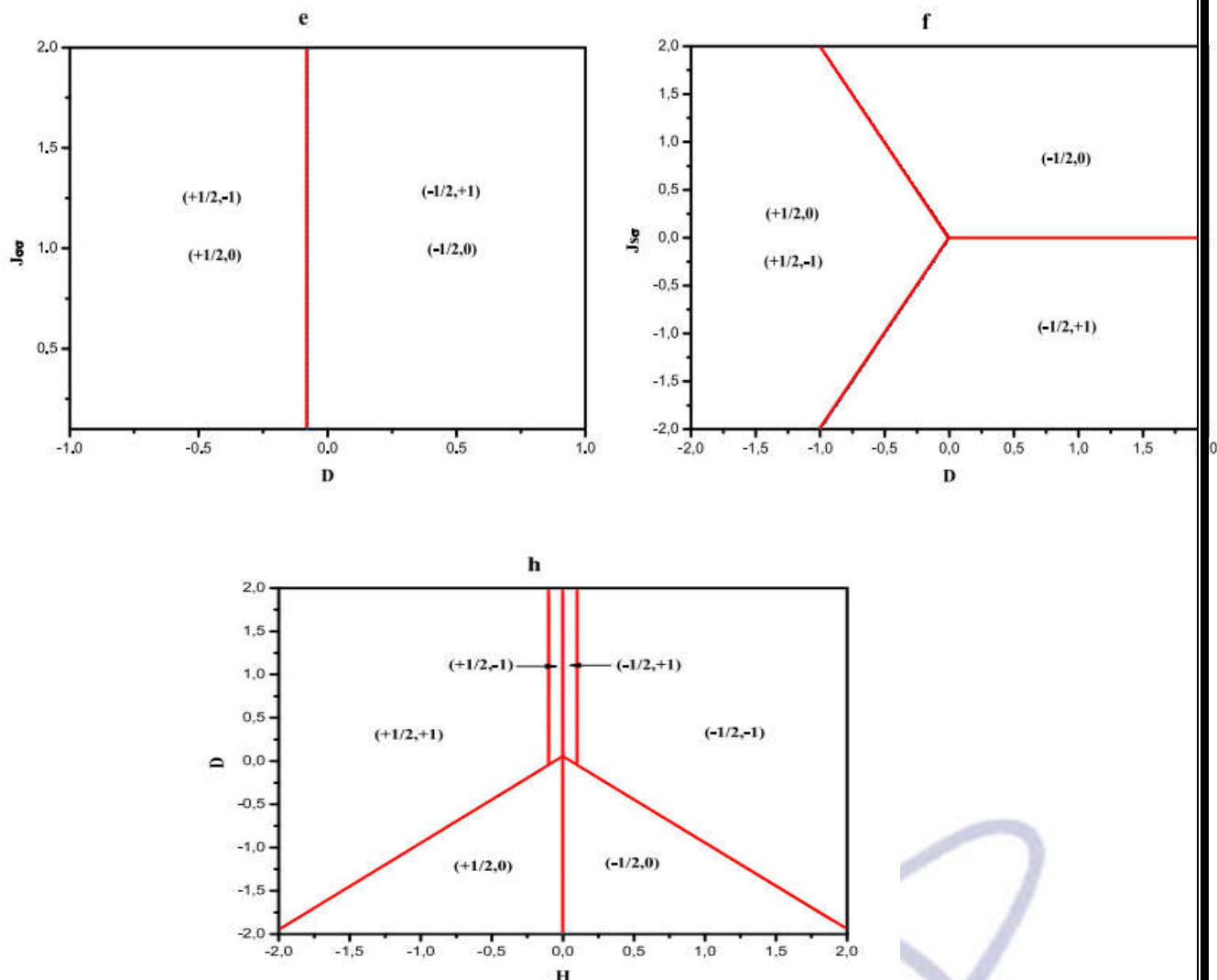


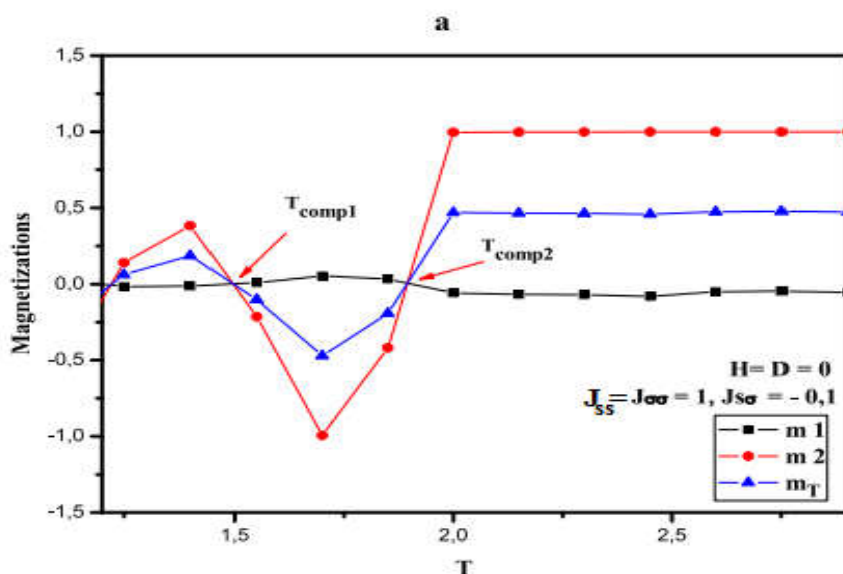
Figure III.11 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental. **(a)** Dans le plan $(J_{\sigma\sigma}, J_{s\sigma})$ pour $J_{ss} = 1$ et $H = \mathcal{F} = 0$. **(b)** Dans le plan $(J_{ss}, J_{s\sigma})$ pour $J_{\sigma\sigma} = 1$ et $H = D = 0$. **(c)** Dans le plan $(H, J_{\sigma\sigma})$ pour $J_{ss} = 1$, $J_{s\sigma} = -0.15$ et $D = 0$. **(d)** Dans le plan $(H, J_{s\sigma})$ pour $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et $D = 0$. **(e)** Dans le plan $(D, J_{\sigma\sigma})$ pour $J_{ss} = 1$, $J_{s\sigma} = -0.15$ et $H = 0$. **(f)** Dans le plan $(D, J_{s\sigma})$ pour $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et $H = 0$. **(h)** Dans le plan (H, D) pour $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et $J_{s\sigma} = -0.15$.

Discussions des diagrammes de phase :

Afin d'inspecter le comportement de la compensation du système étudié, nous révélons l'existence de la température de compensation T_{comp} pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$, et en absence du champ magnétique externe ($H = 0$). En effet, les résultats obtenus sont représentés sur les figures III.12 (a) et (b).

Commençant par la figure III.12 (a), en absence du champ magnétique externe et du champ cristallin ($H = D = 0$), et pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et $J_{s\sigma} = -0.1$. On constate que deux températures de compensation sont présentes sur cette figure.

D'autre part, on fixe la valeur du champ cristallin $D = -1$ et en absence du champ magnétique externe ($H = 0$), une seule température de compensation est trouvée pour les valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et $J_{s\sigma} = -0.9$, comme il est illustré sur la figure III.12 (b). En augmentant de plus en plus le paramètre $J_{s\sigma}$, la température de compensation disparaît et seule la température de Curie habituelle est trouvée.



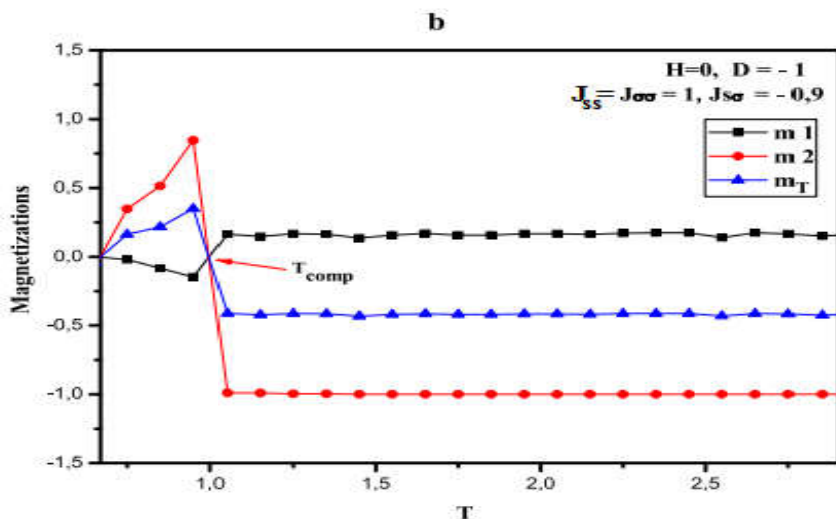
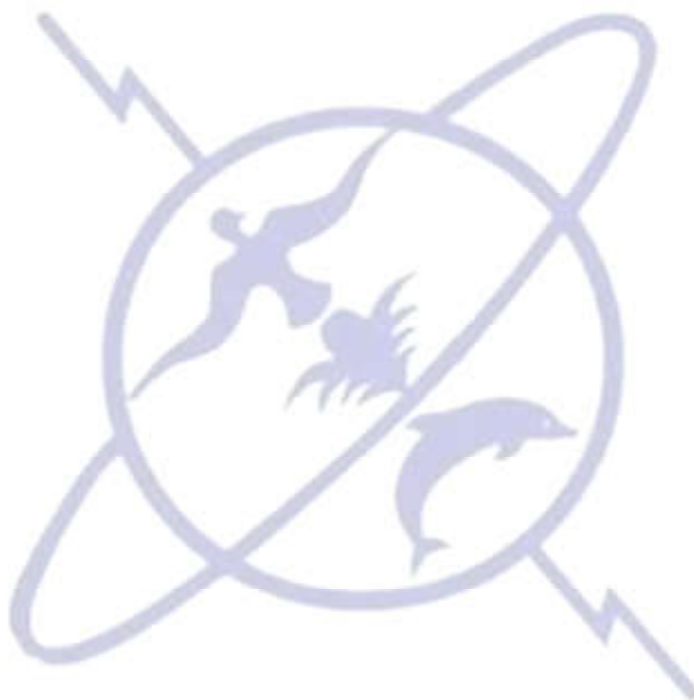


Figure III.12 : Variation de l'aimantation en fonctions des paramètres physiques: **(a)** Les aimantations en fonction de la température T pour : $H = D = 0, J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et $J_{s\sigma} = -0.1$. **(b)** Les aimantations en fonction de la température T pour : $H = 0, J_{\sigma\sigma} = J_{ss} = 1$ et $J_{s\sigma} = -0.9$ et $D = -1$.





Chapitre 4

Etude des phénomènes critiques des Dendrimères

La nanotechnologie est une partie des sciences fondamentales et appliquées. Elle est située à la frontière entre la physique, la chimie, l'ingénierie et les sciences de la vie. Les nanostructures sont devenues la base des découvertes scientifiques les plus fameuses. Parmi ces nanostructures ; les "dendrimères" se caractérisent par une architecture commune dans les systèmes biologiques, les arbres, les vaisseaux sanguins, les neurones, et d'autres structures biologiques. Le terme : "dendrimer" est venu du Grecque "dendrimos" [227], signifiant l'arbre. La structure particulière des dendrimères a posé des questions de recherche dans plusieurs domaines scientifiques, dont cette structure est constituée par; un cœur ou noyau, des branches, et une large surface vide [228-230]. Ces macromolécules sont régulièrement décrites par leurs numéros de générations, par exemple : 0th (G0), 1th (G1), 2th (G2) ainsi de suite. Les Polyamidoamines (PAMAM) est un type particulier du dendrimères dont le cœur est formé par l'Ethylenediamine (EDA) [231-236]. Ce cœur se raccorde à quatre branches pour construire la première génération 0th (G0) de la dendrimère [237]. Les branches des dendrimères PAMAM sont responsables des propriétés structurales des dendrimères.

4.1 Mouillage et transitions de couches dans une nanostructure de dendrimère de polyamidoamine (PAMAM) : (Article: J. of Materials Research Express, Vol. 3(10), (2016), 106104, DOI: 10.1088/2053-1591/3/10/106104)

En se basant sur un nano-système type dendrimère polyamidoamine (PAMAM) (voir Figure IV.1), nous avons fait une étude des propriétés magnétiques de ces nanostructures dans le contexte du mouillage et des transitions de couches. Pour étudier ce système, nous avons effectué des simulations de Monte Carlo conduisant à des résultats intéressants récapitulés dans deux classes. La première classe est consacrée à l'étude des diagrammes de phase de l'état fondamental. La deuxième partie récapitule les propriétés magnétiques pour des

températures non nulles. En outre, nous avons analysé l'effet des paramètres physiques présents dans l'Hamiltonian régissant notre système tel que le champ magnétique externe et les interactions de couplage d'échange entre les spins.

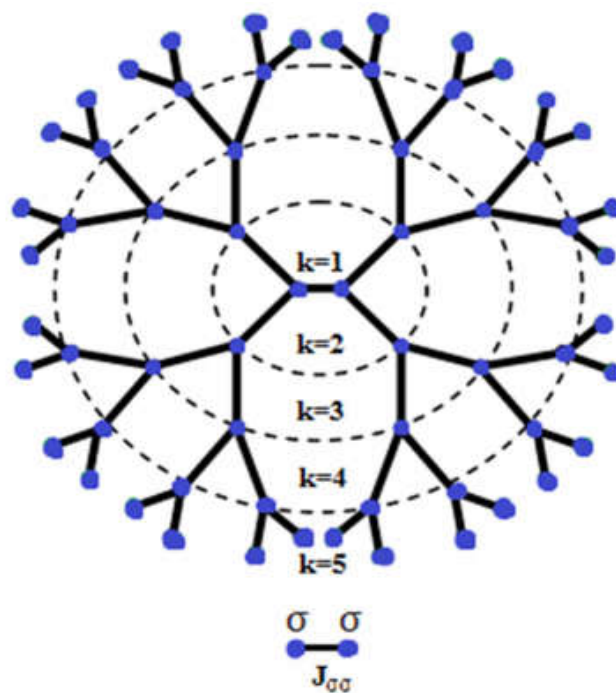


Figure IV.1 : La géométrie d'un nano-système de la dendrimère polyamidoamine (PAMAM) composée par un cœur et des générations, avec le spin $\sigma = 1/2$.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

L'objectif de cette partie est d'étudier les diagrammes de phase de l'état fondamental dans différents plans, à l'aide des paramètres de l'Hamiltonian du système étudié, en comparant et en calculant toutes les configurations d'énergie possibles. Plus précisément, les paramètres intrinsèques et extrinsèques sont responsables de l'apparition des différentes configurations. Ces paramètres sont les interactions de couplage d'échange J , le champ magnétique externe H et le champ magnétique de surface H_s . Les diagrammes de phase de l'état fondamental sont présentés sur les figures IV.2 (a) - (c).

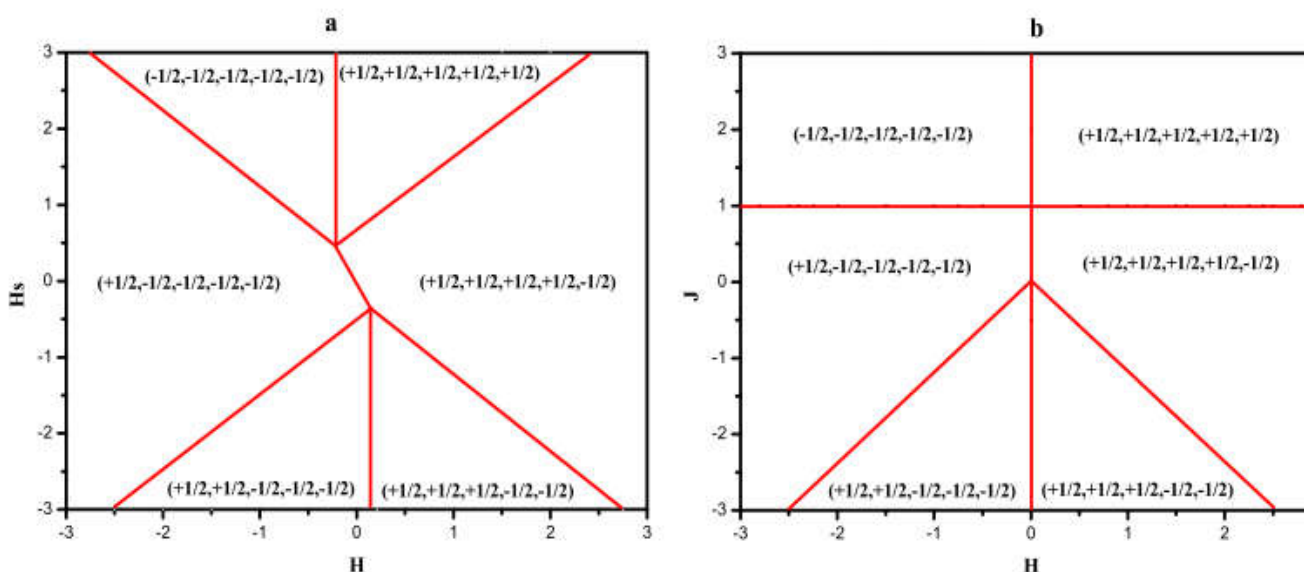
L'Hamiltonian qui décrit le système est donné par:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i \tag{IV.1}$$

Avec : J détermine la constante de couplage d'échange entre deux atomes magnétiques voisins les plus proches de spin $\sigma_i - \sigma_j$, et h_i détermine le champ magnétique longitudinal externe.

Dans le plan (H, H_s) nous avons fixé la valeur d'interaction de couplage d'échange $J = 1$, ainsi nous avons trouvé six configurations stables, comme il est indiqué sur la figure IV.2 (a).

En absence du champ magnétique de surface ($H_s = 0$), voir la figure IV.2 (b), nous avons trouvé six configurations stables. Quatre parmi ces configurations sont stables pour les valeurs d'interaction de couplage d'échanges telles que: $J < 1$. Une symétrie parfaite est présentée dans le plan (H, J) par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$. De même, une symétrie parfaite est présentée dans le plan (H_s, J) par rapport au champ magnétique de surface par rapport à l'axe $H_s = 0$, où six configurations sont stables, comme il est indiqué sur la figure IV.2 (c) en absence du champ magnétique externe.



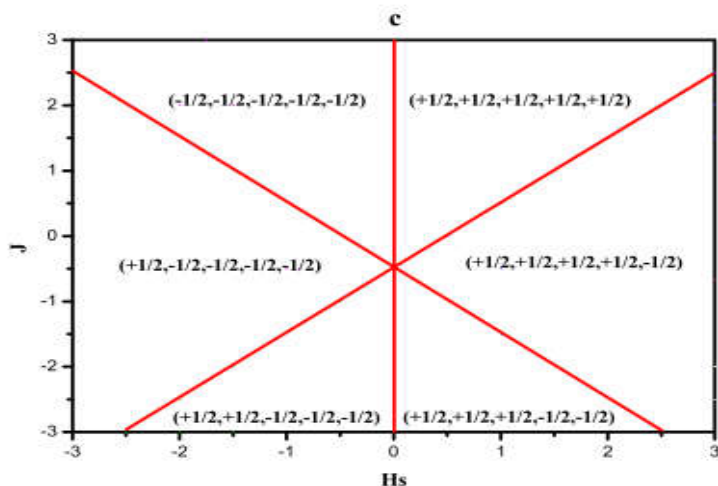


Figure IV.2 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental. (a) Dans le plan (H, H_s) pour $H_{s2} = -H_{s1} \neq 0$ et $J = 1$. (b) Dans le plan (H, J) pour $H_s = 0$. (c) Dans le plan (H_s, J) pour $H = 0$.

Discussions des diagrammes de phase :

Dans cette partie, nous utilisons des simulations de Monte Carlo pour étudier l'effet de l'augmentation de la température ainsi que du champ magnétique externe. En effet, le comportement des aimantations de chaque couche en fonction des champs magnétiques H et H_s est illustré sur les figures IV.3 (a) - (f). Ces figures représentent les variations des aimantations (m_1, m_2, m_3, m_4 et m_5) pour une valeur constante de l'interaction de couplage d'échange $J = 1$.

Afin de montrer l'effet de l'absence du champ magnétique de surface ($H_s = 0$), pour une basse valeur de température $T = 0.5$ K, la figure IV.3 (a) montre le comportement des aimantations de chaque couche: m_1, m_2, m_3, m_4 et m_5 où toutes les couches montrent des transitions de phase du premier ordre.

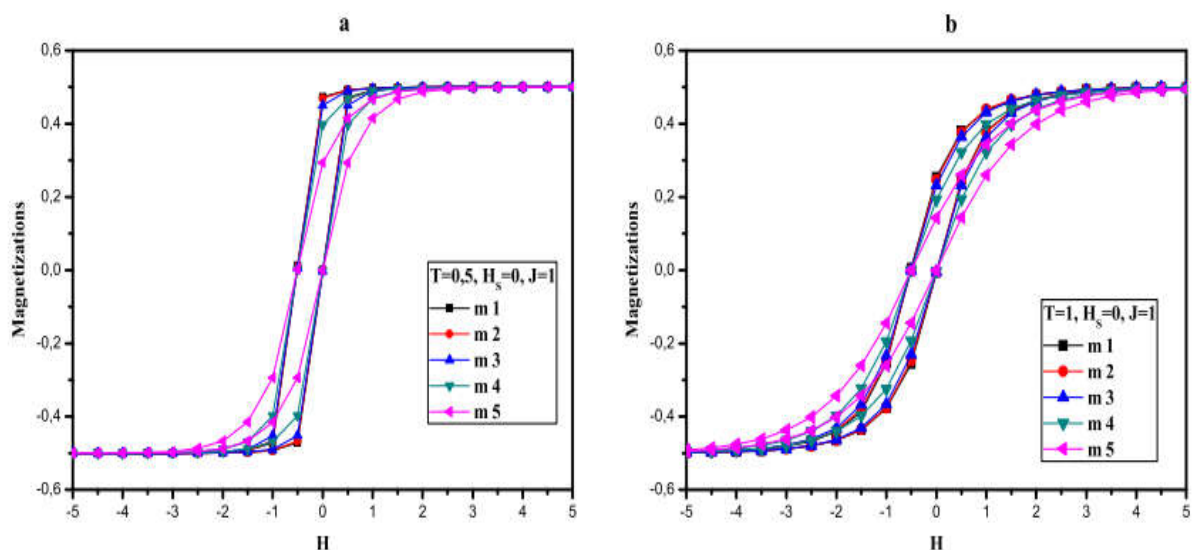
En augmentant la valeur de la température pour atteindre $T = 1$ K, comme il est montré sur la figure IV.3 (b), les aimantations: m_1, m_2, m_3, m_4 et m_5 présentent des transitions de phase du second ordre. Le même scénario est répété dans la figure IV.3 (c), pour une valeur

de température $T = 1.5$ K, avec des aimantations: m_1 , m_2 , m_3 , m_4 et m_5 qui conservent le même comportement.

D'un autre coté, on étudie le comportement des aimantations de chaque couche en fonction du champ magnétique de surface H_s , en l'absence du champ magnétique H pour une basse température $T = 0.5$ K, voir la figure IV.3 (d). En effet, les aimantations: m_1 , m_2 , m_3 , m_4 et m_5 montrent des transitions de phase du premier ordre avec un détachement de la couche m_1 par rapport aux autres couches.

Pour une valeur de la température $T = 1$ K, voir la figure IV.3 (e), les aimantations: m_1 , m_2 , m_3 , m_4 et m_5 présentent des transitions de phase du second ordre avec une séparation entre la couche m_1 des autres couches.

Le même phénomène est répété dans la figure IV.3 (f), pour la valeur de température $T = 1.5$ K, où les aimantations: m_1 , m_2 , m_3 , m_4 et m_5 gardent la transition de phase du second ordre. En comparant les trois dernières figures IV.3 (d) - (f) avec les trois premières figures IV.3 (a) - (c), on constate que l'effet du champ magnétique de surface H_s est de séparer la couche interne m_1 des couches restantes: m_2 , m_3 , m_4 et m_5 , ce qui est confirmé par le comportement des aimantations, voir IV.3 (d) - (f).



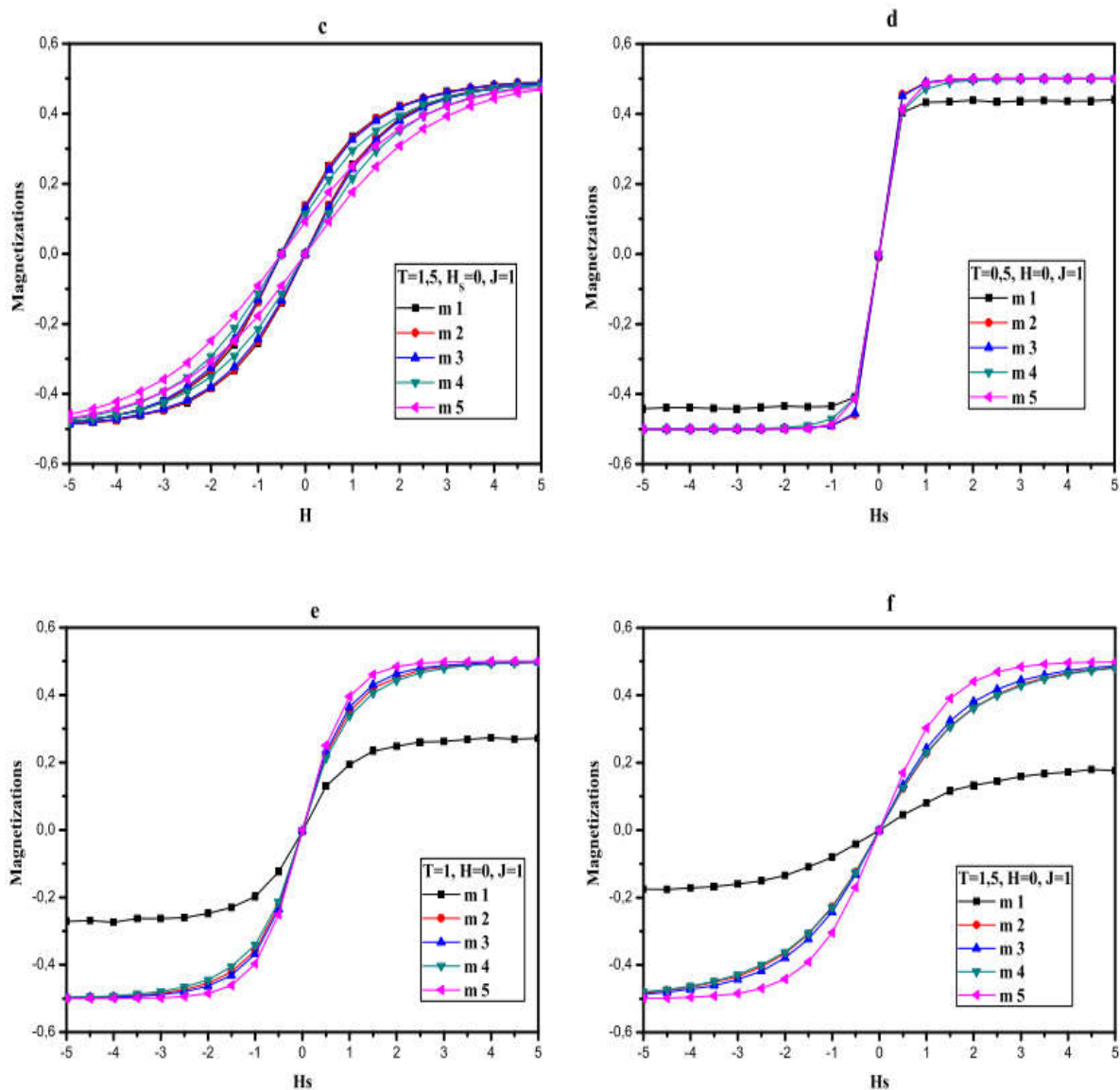


Figure IV.3 : Variation de l'aimantation en fonctions des champs magnétiques H et H_s , pour $J = 1$: (a) Les aimantations en fonction de H pour : $H_s = 0$ et $T = 0.5$ K, (b) Les aimantations en fonction de H pour : $H_s = 0$ et $T = 1$ K, (c) Les aimantations en fonction de H pour : $H_s = 0$ et $T = 1.5$ K, (d) Les aimantations en fonction de H_s pour : $H = 0$ et $T = 0.5$ K, (e) Les aimantations en fonction de H_s pour : $H = 0$ et $T = 1$ K, (f) Les aimantations en fonction de H_s pour : $H = 0$ et $T = 1.5$ K.

4.2 Étude des transitions de couches ordre-désordre dans une nanostructure (PAMAM) :

(Article: J. of Superconductivity and Novel Magnetism, Vol. 30(6), (2016), 1557–1563, DOI: 10.1007/s10948-016-3932-1)

Nous nous sommes intéressés, dans ce travail à l'étude des transitions de phase d'une nanostructure dendrimère polyamidoamine (PAMAM), voir Figure IV.4. En effet, nous avons examiné le phénomène magnétique de l'ordre et désordre sous l'effet d'un champ cristallin variable. Dans un premier temps, nous avons examiné les propriétés magnétiques de cette nanostructure, en absence de la température ($T = 0$ K). Ensuite, nous avons discuté les diagrammes de phase de l'état fondamental dans différents plans. Pour des valeurs non nulles de la température, nous avons appliqué les simulations de Monte Carlo montrant des résultats intéressants, résumés dans différents diagrammes de phase. Nous avons également examiné l'effet de couplage d'interaction sur les transitions de phase du système étudié.

On a l'Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_{i=1}^{N_t} S_i - \sum_{k=1}^5 D_k \left(\sum_{i=1}^{N_k} S_i^2 \right) \quad (\text{IV.2})$$

Avec: J qui dénote la constante de couplage d'échange entre deux atomes magnétiques voisins les plus proches ayant les spins S_i, S_j . Le paramètre H représente le champ magnétique externe appliqué sur tous les spins du système. Pour chaque couche ' k ', le champ cristallin variable est déterminé comme suit:

$$D_k = \frac{D}{k^\alpha} \quad (\text{IV.3})$$

Avec: D dénote le champ cristallin appliqué sur la couche $k=1$, α est constante positive sans dimension.

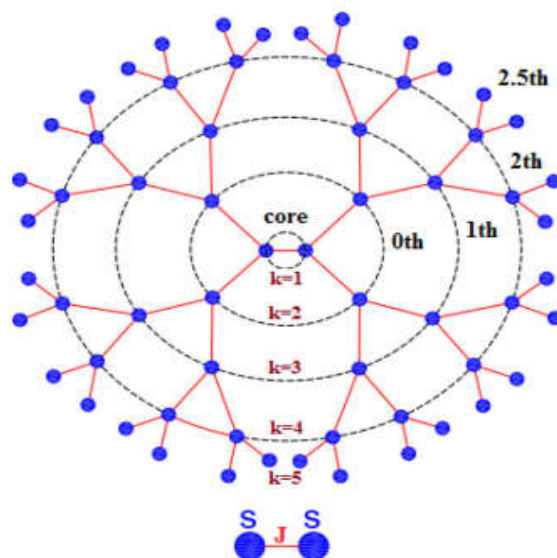


Figure IV.4 : La géométrie d'une nanostructure basée sur une dendrimère composée par un cœur et quatre générations, contenant le spin $S = 1$.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

Dans cette partie de ce travail, nous avons étudié les diagrammes de phase de l'état fondamental. Nous examinons ces diagrammes de phases dans différents plans en calculant et en comparant toutes les configurations d'énergie possibles. À partir de l'Hamiltonian de notre système, en changeant les valeurs numériques des paramètres physiques, on peut générer les différentes configurations possibles dans différents diagrammes de phase.

Table 1 All possible phases present in this work

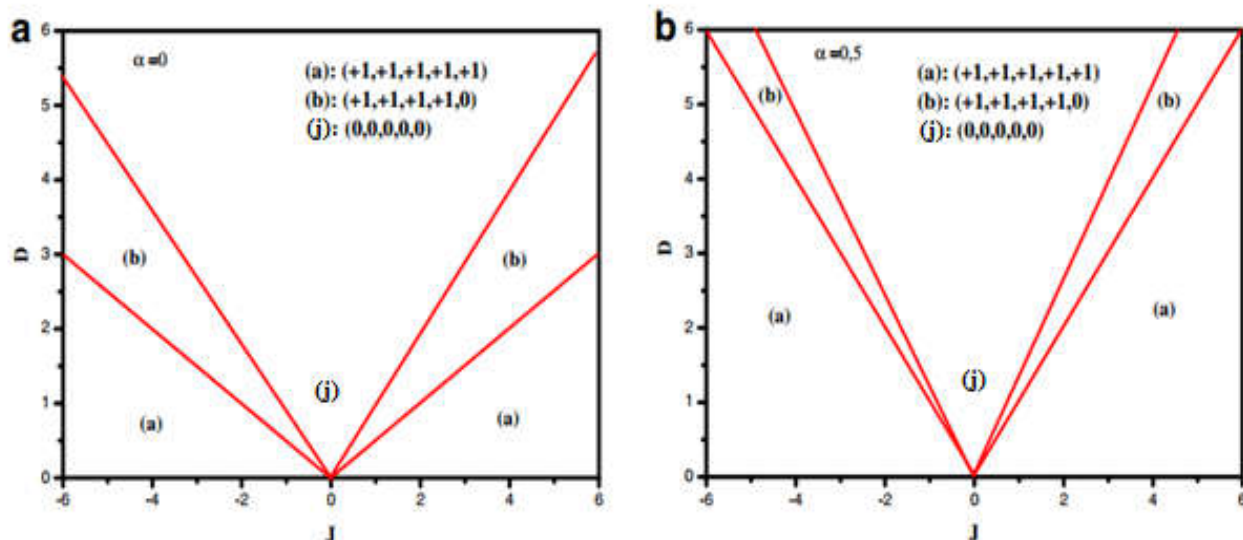
Symbols	Phases
(a) for $T = 0$	(+1, +1, +1, +1, +1)
(a') for $T \neq 0$	(p1, p1, p1, p1, p1)
(b) for $T = 0$	(0, +1, +1, +1, +1)
(b') for $T \neq 0$	(0, p1, p1, p1, p1)
(c) for $T = 0$	(0, 0, +1, +1, +1)
(c') for $T \neq 0$	(0, 0, p1, p1, p1)
(d) for $T = 0$	(0, 0, 0, +1, +1)
(d') for $T \neq 0$	(0, 0, 0, p1, p1)
(e) for $T = 0$	(0, 0, 0, 0, +1)
(e') for $T \neq 0$	(0, 0, 0, 0, p1)
(f) for $T = 0$	(0, +1, +1, +1, 0)
(f') for $T \neq 0$	(0, p1, p1, p1, 0)
(g) for $T = 0$	(0, +1, +1, 0, 0)
(g') for $T \neq 0$	(0, p1, p1, 0, 0)
(h) for $T = 0$	(0,0, +1,0, +1)
(i) for $T = 0$	(0, +1, 0, 0, +1)
(j) \equiv (j') $T = 0$ and $T \neq 0$	(0, 0, 0, 0, 0)
(k) for $T = 0$	(+1, 0, +1,0, +1)
(l) for $T = 0$	(+1, +1, 0, +1, +1)
(m) for $T = 0$	(+1, +1, +1, 0, +1)
(n) for $T = 0$	(0, +1, 0, +1, +1)
(o) for $T = 0$	(+1, +1, +1, +1,0)
(o') for $T \neq 0$	(p1, p1, p1, p1, 0)
(p) for $T = 0$	(+1, 0, +1, +1, +1)
(p') for $T \neq 0$	(p1, 0, p1, p1, p1)
(q') for $T \neq 0$	(p1, p1, p1, 0, 0)
(r') for $T \neq 0$	(p1, p1, 0, 0, 0)
(s') for $T \neq 0$	(p1, 0, 0, 0, 0)
(t') for $T \neq 0$	(0, p1, 0, 0, 0)
(u') for $T \neq 0$	(0, 0, p1, 0, 0)
(v') for $T \neq 0$	(0, 0, p1, p1, 0)
(w') for $T \neq 0$	(0, 0, 0, p1,0)

En effet, les diagrammes de phase de l'état fondamental sont présentés sur les figures IV.5 (a)-(d) où les différentes configurations sont représentées dans le plan (J, D). A partir de ces

figures, on peut constater que le nombre total des configurations stables dépend fortement de la valeur du paramètre physique choisi.

Pour les valeurs de la constante $\alpha = 0$ et $\alpha = 0.5$, (voir les figures IV.5 (a) et (b)), dans lesquels seulement trois configurations sont stables. Ces configurations stables occupent les différentes régions du diagramme de phase de l'état fondamental. En augmentant la valeur du paramètre α , (voir les figures IV.5 (c) et (d)), pour atteindre les valeurs $\alpha = 1$ et $\alpha = 2$, des nouvelles phases apparaissent dans différentes régions du plan (J, D).

D'autre part, une symétrie parfaite est présentée sur toutes les figures par rapport au paramètre de couplage d'interaction d'échange par rapport à l'axe $J = 0$. Ainsi, il convient de noter que l'effet du croisement du paramètre α diminue la région occupée par la phase paramagnétique notée (j), voir tableau 1. Ceci indique que l'augmentation des valeurs du paramètre α favorise les phases ordonnées parmi toutes les configurations possibles.



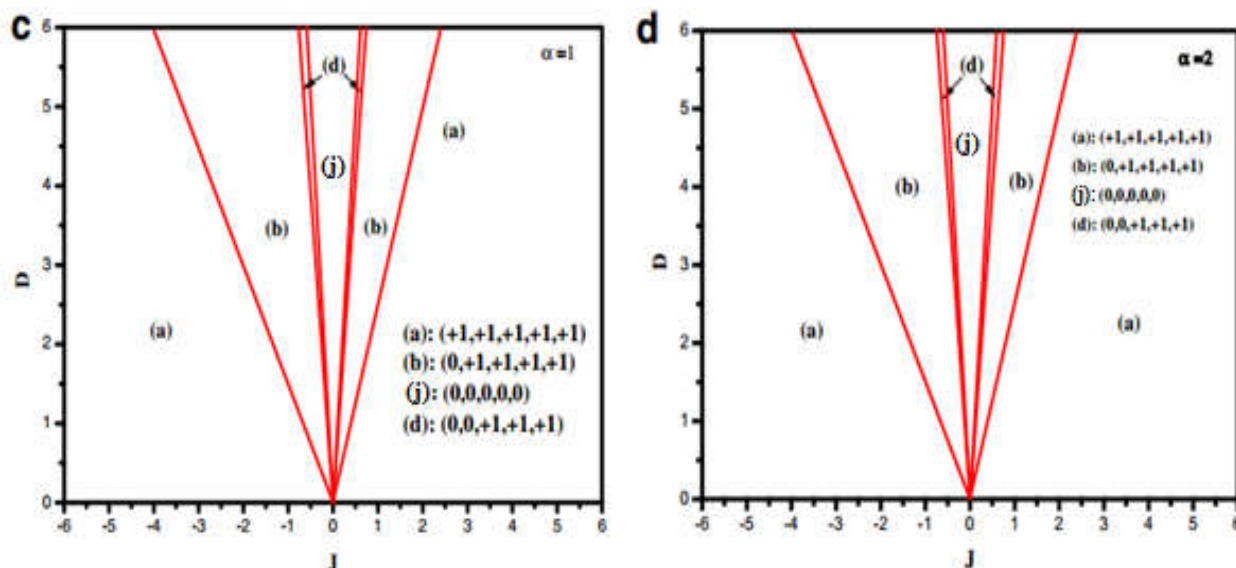


Figure IV.5 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental: **(a)** Dans le plan (J, D) pour $\alpha = 0$. **(b)** Dans le plan (J, D) pour $\alpha = 0,5$. **(c)** Dans le plan (J, D) pour $\alpha = 1$. **(d)** Dans le plan (J, D) pour $\alpha = 2$.

Discussions des diagrammes de phase :

Afin de présenter le comportement des aimantations partielles m_k en fonction du champ cristallin D et du couplage d'interaction d'échange J pour une valeur fixe du paramètre : $\alpha = 1$, nous présentons les profils des aimantations sur les figures IV.6 (a) - (d).

Pour une valeur faible de température ($T = 1$ K) et pour une valeur fixe du couplage d'interaction d'échange ($J = 1$), voir la figure IV.6 (a), toutes les couches transitent simultanément de la phase ordonnée $m_k(k = 1, \dots, 5) = -1$ vers la phase ordonnée $m_k(k = 1, \dots, 5) = +1$. Pour les valeurs négatives du champ cristallin D , l'effet d'augmenter la température ($T = 3$ K) est d'ordonner toutes les couches, ce résultat est illustré sur la figure IV.6 (b).

D'autre part, nous présentons sur la figure IV.6 (c) les aimantations en fonction du couplage d'échange J pour une valeur fixe du champ cristallin ($D = 1$). Pour une valeur faible de la température ($T = 1$ K), la couche m_5 n'est pas affectée par l'augmentation des valeurs des

interactions de couplage d'échange J . Alors que toutes les autres couches s'entassent sous l'effet croissant de ce paramètre.

Pour une valeur plus élevée de température ($T = 3$ K), certaines transitions de couches se produisent pour des valeurs négatives du paramètre J , alors que toutes les couches sont ordonnées pour les valeurs élevées et positives de ce paramètre, voir la figure IV.6 (d).

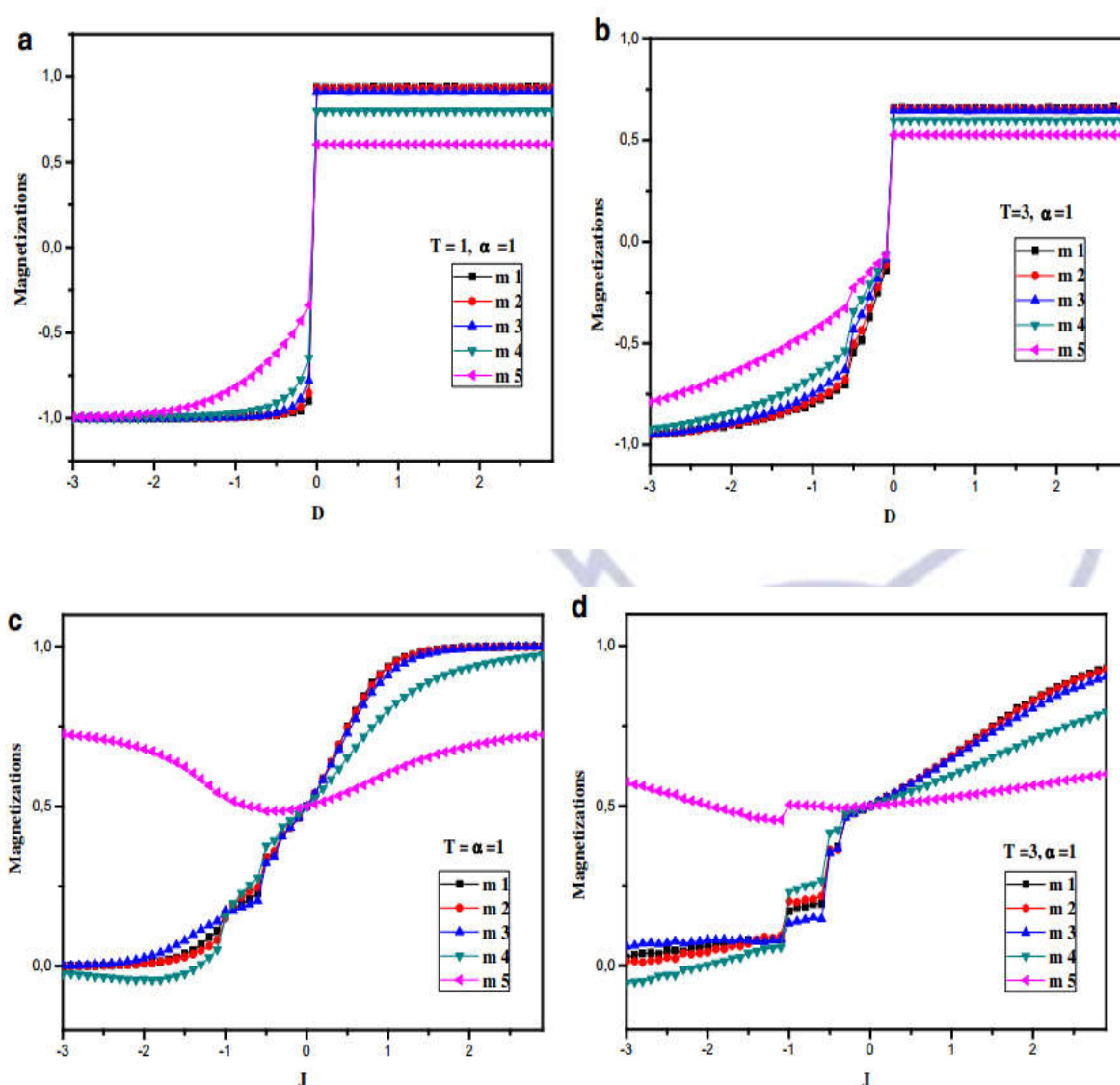


Figure IV.6 : Variation des aimantations en fonction des paramètres du système: **(a)** Les aimantations en fonction de D pour : $\alpha = 1, J = 1$ et $T = 1$ K. **(b)** Les aimantations en fonction de D pour : $\alpha = 1, J = 1$ et $T = 3$ K. **(c)** Les aimantations en fonction de J pour :

$\alpha = 1, D = 1$ et $T = 1 K$. (d) Les aimantations en fonction de J pour : $\alpha = 1, D = 1$ et $T = 3 K$.

4.3 Transitions de couches magnétiques dans une nanostructure de dendrimère de polyamidoamine (PAMAM) :

(Article: J. of Materials Research Express, Vol. 4(2), (2017), 026102, DOI: 10.1088/2053-1591/aa5b51)

Dans cette partie, nous allons présenter les transitions de couches magnétiques dans une nanostructure de dendrimère de type polyamidoamine (PAMAM), sous l'effet d'un champ magnétique externe (voir Figure IV.4). Nous avons examiné les propriétés magnétiques de cette nanostructure réelle utilisée dans plusieurs domaines scientifiques. En absence de l'effet de la température ($T = 0 K$), nous avons donné et discuté les diagrammes de phase de l'état fondamental. Pour des températures non nulles, nous avons appliqué les simulations de Monte Carlo donnant lieu à des résultats importants que nous présentons sous la forme des diagrammes de phase. Nous avons également analysé l'effet de la variation du champ magnétique externe, en particulier nous avons trouvé la superposition des états dans cette dendrimère (PAMAM).

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

En utilisant les paramètres de l'Hamiltonian (voir l'équation (IV.2)) nous étudions l'effet du champ magnétique externe H sur les transitions de couches du système étudié, pour une valeur fixe du champ cristallin ($D = 1$) nous avons tracé les diagrammes de phase de l'état fondamental sur les figures IV.7 (a) - (d) dans le plan (J, H).

En effet, pour une valeur nulle du paramètre α (voir la figure IV.7 (a)), nous avons trouvé dix phases stables. Dans cette figure, on trouve une symétrie parfaite par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$. Ainsi que la plus part des phases sont trouvées pour les valeurs négatives du paramètre d'interaction de couplage d'échange J .

Pour montrer l'effet de la variation du paramètre α , on trace sur les figures IV.7 (b) - (d) les configurations stables des diagrammes de phase de l'état fondamental dans le plan (J, H). On constate que plusieurs phases disparaissent en augmentant les valeurs de α . Le fait que

l'augmentation des valeurs α diminue le champ cristallin appliqué sur chaque couche m_k ($k = 1, 2, 3, 4$, et 5) selon le rapport $1/k^\alpha$ (voir l'équation (IV.3)) fait donc disparaître à la fois le nombre de certaines phases et apparaître certaines autres nouvelles phases. En effet, dans la figure IV.7 (b), les nouvelles phases sont notées par: (c), (d) et (e). D'un autre côté, une seule nouvelle phase notée (p) apparaît dans la figure IV.7 (c). Pour la valeur $\alpha = 2$, la phase paramagnétique notée (j) disparaît complètement à cause de cette grande valeur de α , voir la figure IV.7 (d).

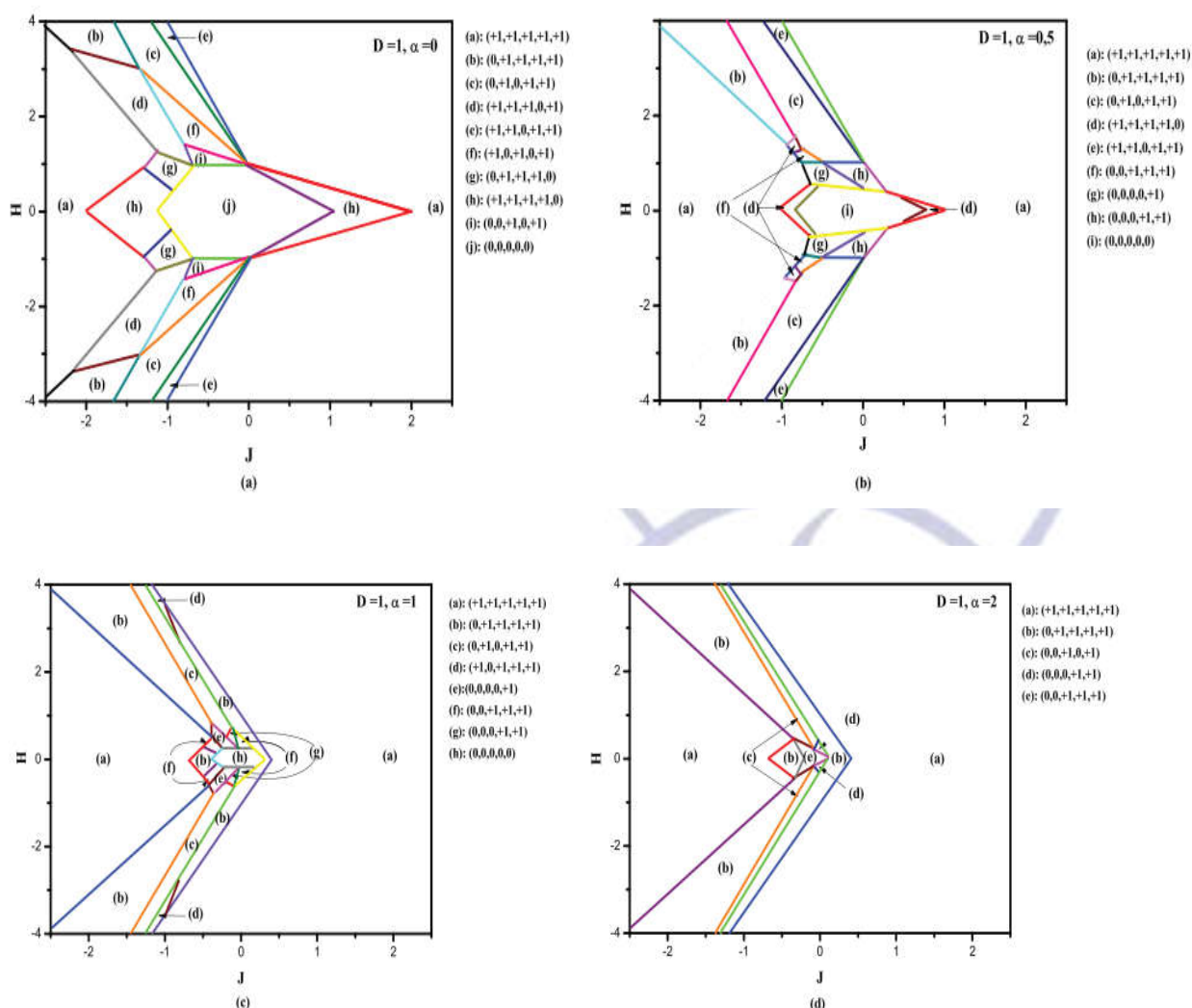


Figure IV.7 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental: **(a)** Dans le plan (J, H) pour : $D = 1$ et $\alpha = 0$. **(b)** Dans le plan (J, H) pour : $D = 1$ et $\alpha = 0.5$. **(c)** Dans le plan (J, H) pour : $D = 1$ et $\alpha = 1$. **(d)** Dans le plan (J, H) pour : $D = 1$ et $\alpha = 2$.

Discussions des diagrammes de phase :

Afin de montrer l'effet du comportement de chaque couche d'aimantation m_k ($k = 1, \dots, 5$) en fonction à la fois de la température T et du champ magnétique externe H , on trace sur les figures IV.8 (a) - (f) les profils correspondants. En effet, les figures IV.8 (a) - (c) présentent le profile des aimantations en fonction de la température T pour des valeurs fixes du champ magnétique externe, du champ cristallin et du couplage d'interaction d'échange ($H = D = J = 1$), en augmentant la valeur du paramètre α .

Pour une valeur nulle du paramètre ($\alpha = 0$), la couche $k=5$ transite de la phase ordonnée $m_{k(k=5)} = +0.35$ pour atteindre la saturation. La couche $k=4$ transite de la phase ordonnée $m_{k(k=4)} \approx +0.8$ pour atteindre la saturation. Alors que les autres couches $m_{k(k=1, \dots, 3)}$ transitent de la phase ordonnée $m_k = +1$ vers la saturation, voir la figure IV.8 (a).

Dans la figure IV.8 (b), correspondant à la valeur du paramètre ($\alpha = 0.5$) les couches m_1 , m_2 , m_3 et m_4 transitent simultanément de la phase ordonnée $m_{k(k=1, \dots, 4)} = +1$ pour atteindre la saturation, mais la couche m_5 transite de la phase ordonnée $m_k(k=5) = +0.5$ pour atteindre la saturation.

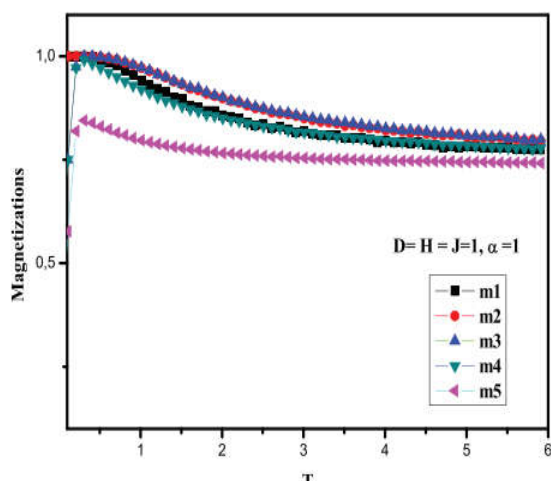
En augmentant la valeur du paramètre ($\alpha = 1$), les couches passent de la phase ordonnée $m_{k(k=1, \dots, 3)} = +1$ pour atteindre la saturation, alors que la couche $k=4$ transite de la phase ordonnée $m_{k(k=4)} = +0.75$ pour atteindre la saturation. La couche $k=5$ transite de la phase ordonnée $m_{k(k=5)} \approx +0.6$ pour atteindre la saturation pour les faibles valeurs de la température, voir la figure IV.8 (c).

Dans les figures IV.8 (d) - (f), on présente les aimantations en fonction du champ magnétique externe H pour des valeurs fixes du champ cristallin, du couplage d'interaction d'échange et de la température ($D = J = 1, T = 1$ K), en augmentant la valeur du paramètre α .

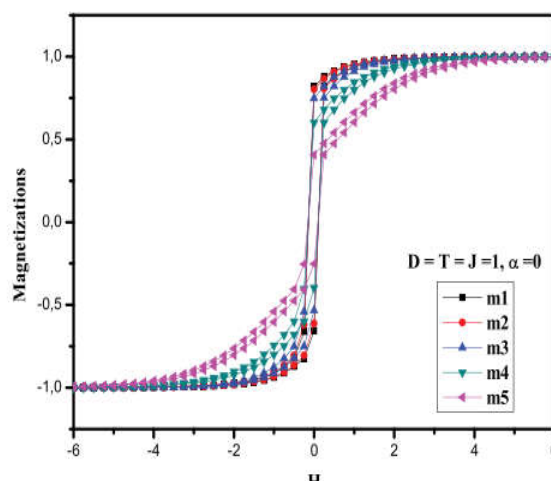
En effet, pour une valeur nulle du paramètre ($\alpha = 0$), voir la figure IV.8 (d), toutes les couches transitent simultanément de la phase ordonnée $m_{k(k=1, \dots, 5)} = -1$ à la phase ordonnée $m_{k(k=1, \dots, 5)} = +1$ pour les grandes valeurs positives du champ magnétique externe.

Pour la valeur du paramètre ($\alpha = 0.5$) toutes les couches transitent simultanément de la phase ordonnée $m_{k(k=1,\dots,5)} = -0.9$ à la phase ordonnée $m_{k(k=1,\dots,5)} = +0.9$ pour les grandes valeurs positives du champ magnétique externe, voir la figure IV.8 (e).

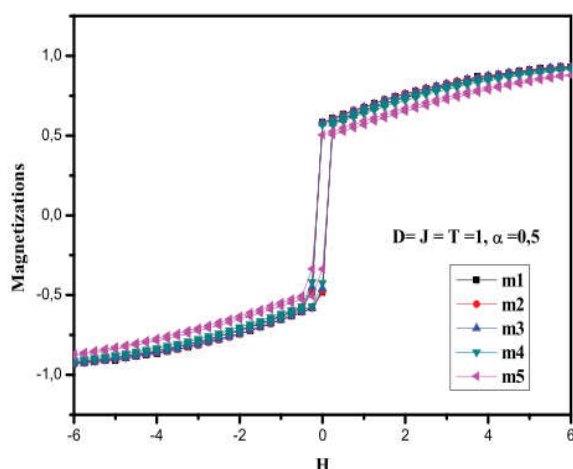
De même, on trouve dans la figure IV.8 (f) que toutes les couches ($k = 1, \dots, 5$) passent de la phase ordonnée $m_{k(k=1,\dots,5)} = -1$ à la phase ordonnée $m_{k(k=1,\dots,5)} = +1$ pour les grandes valeurs positives du champ magnétique externe pour une valeur du paramètre ($\alpha = 1$). La saturation est rapidement atteinte pour ($\alpha = 1$) comparé avec la figure IV.8 (e) dans laquelle nous avons fixé ($\alpha = 0.5$).



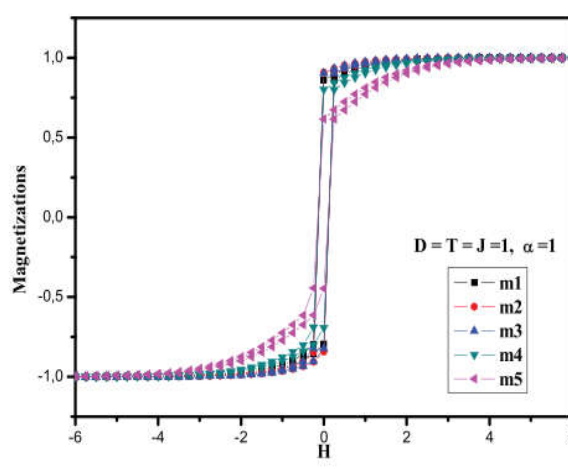
(c)



(d)



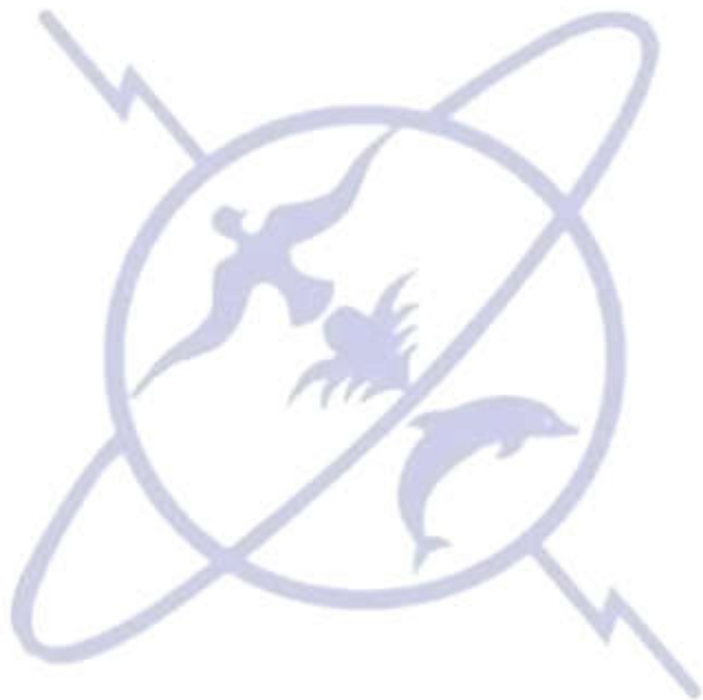
(e)



(f)

Figure IV.8 : Variation des aimantations en fonction des paramètres du système: **(a)** Les aimantations en fonction de T pour : $H = D = J = 1$ et $\alpha = 0$, **(b)** Les aimantations en fonction de T pour : $H = D = J = 1$ et $\alpha = 0.5$, **(c)** Les aimantations en fonction de T pour : $H = D = J = 1$ et $\alpha = 1$, **(d)** Les aimantations en fonction de H pour : $D = J = 1$, $T = 1$ K et $\alpha = 0$, **(e)** Les aimantations en fonction de H pour : $D = J = 1$, $T = 1$ K et $\alpha = 0.5$, **(f)** Les aimantations en fonction de H pour : $D = J = 1$, $T = 1$ K et $\alpha = 1$.





Chapitre 5

Etude du comportement critique des Fullerènes

Durant ces dernières années, la nanotechnologie a progressé dans plusieurs domaines scientifiques grâce à la découverte des fullerènes. Cette découverte a entraîné une augmentation rapide de la recherche sur le carbone en tant que « atome élémentaire » dans les fullerènes. Cela aide à préparer un bon moyen de trouver d'autres nanomatériaux de carbone, y compris les nanotubes, le graphène et des autres structures exotiques. Un fullerène est une molécule composée entièrement de carbone, sous la forme d'une sphère creuse ou d'une ellipsoïde. Les fullerènes sphériques sont également "dits" des boules Bucky, des nanotubes ou des tubes Bucky. Les fullerènes sont similaires en structure au graphite, qui est composé de feuilles de graphène empilées d'anneaux hexagonaux liés. La découverte des fullerènes a fait augmenter le nombre d'allotropes de carbone connus. Les Bucky-balls et Bucky-tubes ont fait l'objet d'une recherche intense, à la fois pour leurs applications technologiques et aussi dans la nanotechnologie. De nos jours, ces structures sont devenues des molécules importantes dans la recherche scientifique et industrielle. Les fullerènes ont montré des propriétés très pratiques dans les applications expérimentales [238-243]. En effet, les travaux les plus récents mettent l'accent sur ces nanostructures pour étudier leurs propriétés magnétiques. Les fullerènes et leurs dérivés constituent également des éléments de base des dispositifs organiques potentiels et performants [244-249].

5.1 Propriétés magnétiques dans les fullerènes: X_{20} , X_{60} , X_{70} :

(Article: J. of Superconductivity and Novel Magnetism, Vol. 30(4), (2016), 925-930, DOI: 10.1007/s10948-016-3867-6)

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés magnétiques d'une géométrie de type fullerènes: X_{20} , X_{60} et X_{70} où le symbole X peut être assigné à n'importe quel atome magnétique (voir Figure V.1). En utilisant la méthode de Monte Carlo, on étudie le comportement thermique des aimantations et des susceptibilités de tels systèmes. En effet,

nous avons montré que la température critique augmente de façon non-linéaire en augmentant le nombre d'atomes constituant le système étudié. Aussi, le champ coercitif croît linéairement lorsque le nombre d'atomes dans la structure augmente.

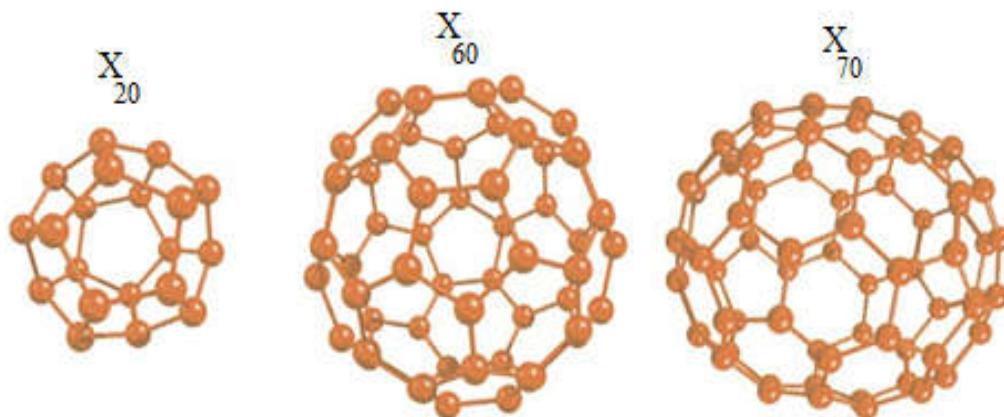


Figure V.1 : Les géométries des fullerènes X_{20} , X_{60} et X_{70} , chaque structure est formée par des atomes de spin $\sigma = 1/2$.

Discussions des diagrammes de phase :

Pour étudier le comportement des aimantations et des susceptibilités en fonction de la température T , nous explorons les simulations de Monte Carlo. Pour ce faire, on fixe la valeur de la constante d'interaction de couplage ($J = 1$) en absence du champ externe ($H = 0$). En effet, on trace les comportements des aimantations m_σ et des susceptibilités χ_σ , voir les figures V.2 (a) et (b), respectivement.

L'Hamiltonian qui décrit le système est donné par:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (V.1)$$

Avec : J détermine la constante de couplage d'échange entre deux atomes magnétiques les premiers proches voisins de spin $\sigma_i - \sigma_j$, et H représente le champ magnétique externe.

Pour une valeur basse de la température ($T < 0.435$ K), nous avons trouvé que les aimantations sont constantes et égales à $m_\sigma = 0.5$ quel que soit la taille du système considéré. Ensuite, les aimantations subissent une transition de premier ordre pour le système

X_{20} et une transition de second ordre pour les structures X_{60} et X_{70} , qui se produisent aux températures de transition notées « T_c », voir la figure V.2 (a). De telles transitions des aimantations entraînent des pics dans les susceptibilités, voir la figure V.2 (b). On a constaté que la température de transition « T_c » augmente quand on augmente le nombre d'atomes dans le système étudié. Cela permet de lier ce résultat avec la masse molaire de la structure étudiée : X_{20} , X_{60} ou X_{70} . Par la suite on posera « $X=C$ », pour les notations couramment utilisées dans la littérature pour les structures de Carbone.

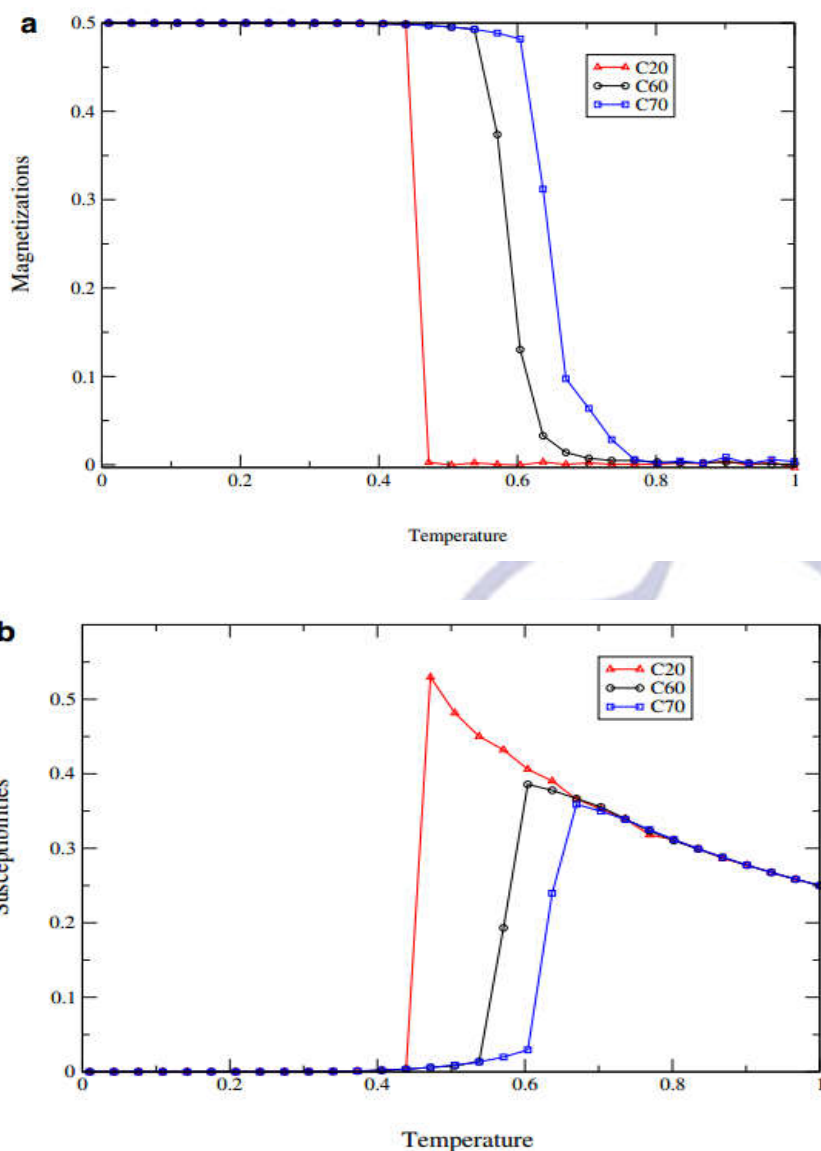
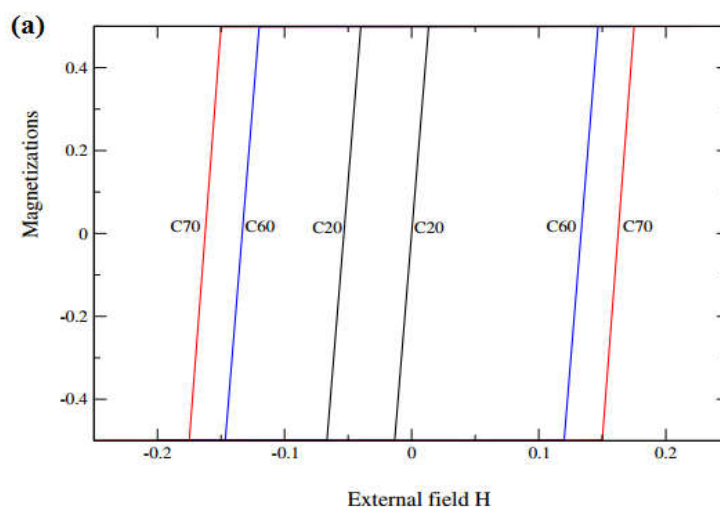


Figure V.2 : Variation de l'aimantation et de la susceptibilité des fullerènes C_{20} , C_{60} et C_{70} pour des valeurs fixes des paramètres: $H = 0$ et $J = 1$: **(a)** Les aimantations en fonction de la température T . **(b)** Les susceptibilités en fonction de la température T .

Pour étudier l'effet de la taille d'un fullerène sur le champ magnétique coercitif H_c , nous avons illustré ce phénomène sur la figure V.3 (a), pour une valeur fixe de la température ($T = 0.4$ K) et une interaction de couplage d'échange ($J = 1$). En effet, nous avons constaté que ce champ coercitif H_c augmente lorsque le nombre d'atomes augmente pour chaque structure: C_{20} , C_{60} et C_{70} . Ce comportement peut être expliqué par la forte interaction d'échange entre les spins de la structure étudiée. Par conséquent, le système devient alors un matériau dur.

En absence de tout champ magnétique externe ($H = 0$), nous avons examiné l'effet des interactions de couplage d'échange J , sur les aimantations et les susceptibilités, pour une valeur fixe de la température ($T = 0.4$ K). En effet, une transition de premier ordre apparaît dans les trois structures, comme l'indique le comportement des aimantations ainsi que les susceptibilités. Une telle transition se produit pour des valeurs croissantes d'interaction de couplage d'échange lors de l'augmentation du nombre d'atomes dans chaque système, voir les figures V.3 (b) et (c).



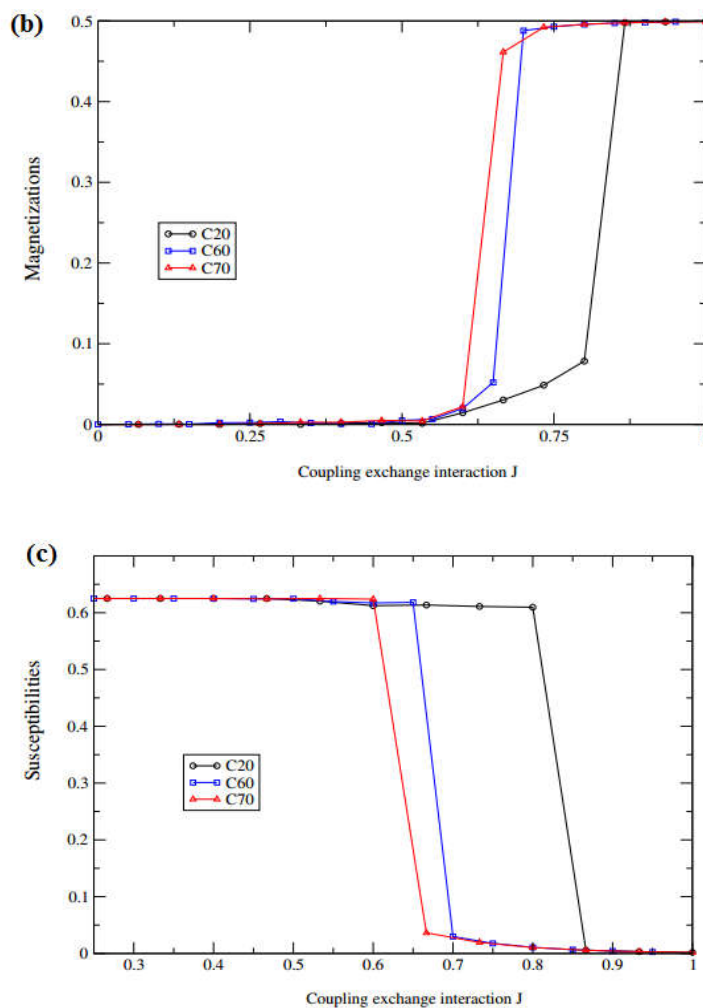


Figure V.3 : Variation de l'aimantation et de la susceptibilité pour les fullerènes X_{20} , X_{60} et X_{70} , pour $T = 0.4$ K: **(a)** Les aimantations en fonction du champ magnétique externe H pour : $J = 1$, **(b)** Les aimantations en fonction d'interaction de couplage d'échange J pour : $H = 0$, **(c)** Les susceptibilités en fonction d'interaction de couplage d'échange J pour : $H = 0$.

5.2 Le phénomène de compensation dans une structure à double fullerène : (Article: Travail soumis pour publication)

Les simulations de Monte Carlo ont été appliquées pour étudier les propriétés magnétiques dans une double structure de fullerène de type X_{60} constituant un core/shell (voir Figure V.4). Dans une telle structure le symbole X peut être affecté à n'importe quel atome présentant un moment magnétique. Notre système est composé d'une sphère à noyau-coquille et composé de deux couches constituées par les spins: $S = 1/2$ dans le core; et $\sigma = 1$ dans le shell. Dans ce qui suit, nous allons envisager l'effet des interactions de couplage et du champ cristallin, sur une telle structure. En effet, le comportement des différentes configurations est présenté sous la forme des diagrammes de phase de l'état fondamental. Nous avons aussi inspecté l'effet du champ magnétique externe et les interactions de couplage sur les cycles d'hystérésis. L'influence de la température sur l'état d'un tel système est également examinée. Les résultats trouvés sont illustrés dans différents diagrammes de phase.

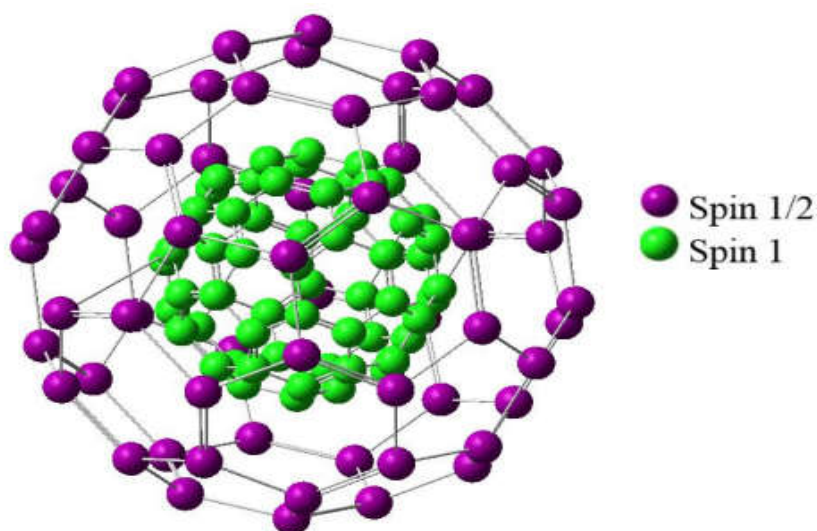


Figure V.4 : Géométrie d'un double fullerène type X_{60} formé par deux couches avec les spins $S = 1/2$ et $\sigma = 1$.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

Dans cette partie, nous étudions les propriétés magnétiques d'un double fullerène, en absence de toute fluctuation de température ($T = 0$ K). En effet, les énergies de toutes les

CENTRE D'ETUDES DOCTORALES - SCIENCES ET TECHNOLOGIES

configurations possibles ($2 \times 3 = 6$) sont calculées à partir de l'Hamiltonian proposé, et comparées dans les diagrammes de phase de l'état fondamental représentés sur les figures V.5 (a) - (d).

L'Hamiltonian qui décrit le système est donné par:

$$\mathcal{H} = -J_{sh} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - J_c \sum_{k,l} S_k S_l - J_{int} \sum_{i,k} \sigma_i S_k - \sum_i h_i (\sigma_i + S_i) - \Delta \sum_i \sigma_i^2 \quad (V.2)$$

Où: J_{sh} et J_c déterminent la constante de couplage d'échange entre deux premiers voisins les plus proches de spin $\sigma - \sigma$ et $S - S$ respectivement. J_{int} est la constante d'interaction de couplage d'échange entre deux atomes magnétiques voisins les plus proches de spin $S - \sigma$. Le champ cristallin Δ est appliqué à tous les σ -spins, et h_i représente le champ magnétique longitudinal externe.

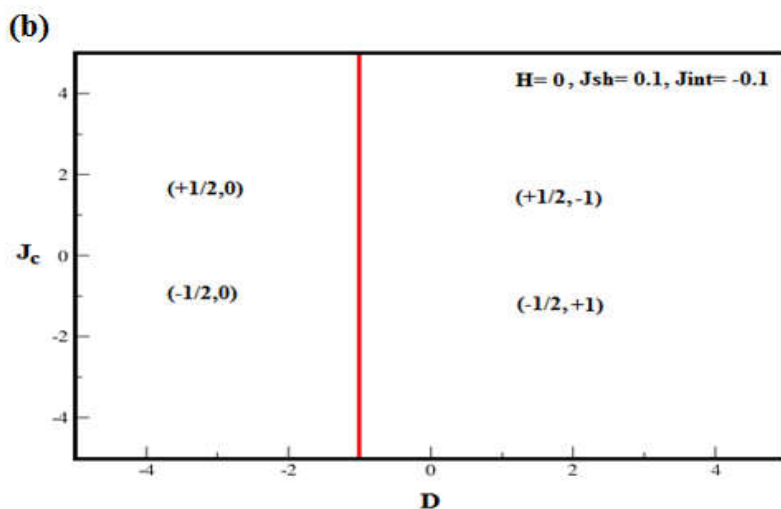
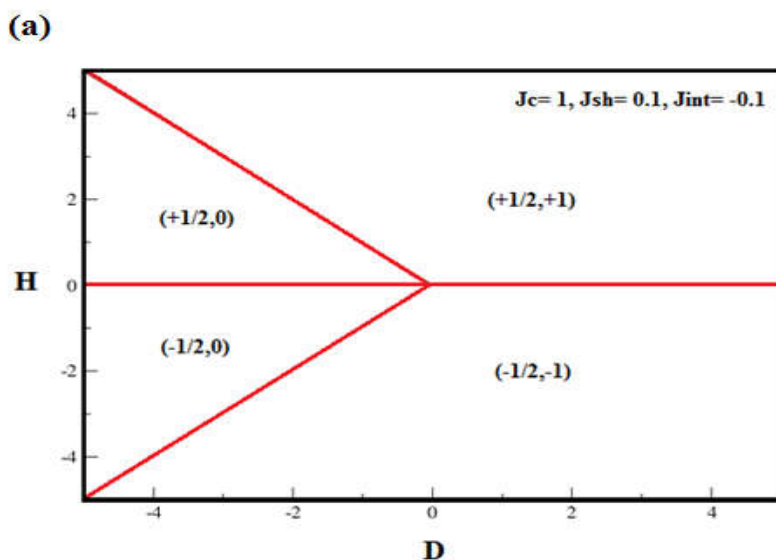
Nous présentons dans le plan (D, H) , toutes les configurations stables, pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_c = 1$, $J_{sh} = 0.1$ et $J_{int} = -0.1$. Une symétrie parfaite est trouvée, par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$, aussi toutes les phases possibles sont trouvées pour les valeurs négatives du champ cristallin D . D'autre part, seules deux phases sont stables pour les valeurs positives de ce paramètre avec des grandes régions dans le plan du diagramme de phase, voir la figure V.5 (a)

En l'absence du champ magnétique externe ($H = 0$), des nouvelles phases apparaissent dans le plan (D, J_c) pour les valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{sh} = 0.1$ et $J_{int} = -0.1$, voir la figure V.5 (b). Ainsi, toutes les six phases possibles sont trouvées pour les valeurs négatives du champ cristallin D . Alors que seulement deux phases sont trouvées stables pour les valeurs positives de ce paramètre.

D'un autre côté, on fixe les valeurs des interactions de couplage d'échange : $J_{sh} = 0.1$ et $J_c = 1$, en l'absence du champ magnétique externe ($H = 0$) on trouve que dans le plan (D, J_{int}) toutes les configurations possibles sont présentes, pour les valeurs négatives du champ cristallin D , voir figure V.5 (c). Par ailleurs seules quatre phases sont stables pour les valeurs positives de ce paramètre avec des grandes régions, voir la même figure.

CENTRE D'ETUDES DOCTORALES - SCIENCES ET TECHNOLOGIES

Pour illustrer l'effet du champ cristallin, nous présentons les configurations stables dans le plan (D, J_{sh}) pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{int} = -0.1$ et $J_c = 1$. En l'absence du champ magnétique externe ($H = 0$), une symétrie parfaite est trouvée, en ce qui concerne le champ cristallin par rapport à l'axe $D = 0$. Nous avons également trouvé les mêmes phases de la figure V.5 (b), où seules deux phases se révèlent stables pour les valeurs positives du champ cristallin D . De plus, deux phases se révèlent stables pour les valeurs négatives de ce paramètre avec des grandes régions, voir la figure V.5 (d).



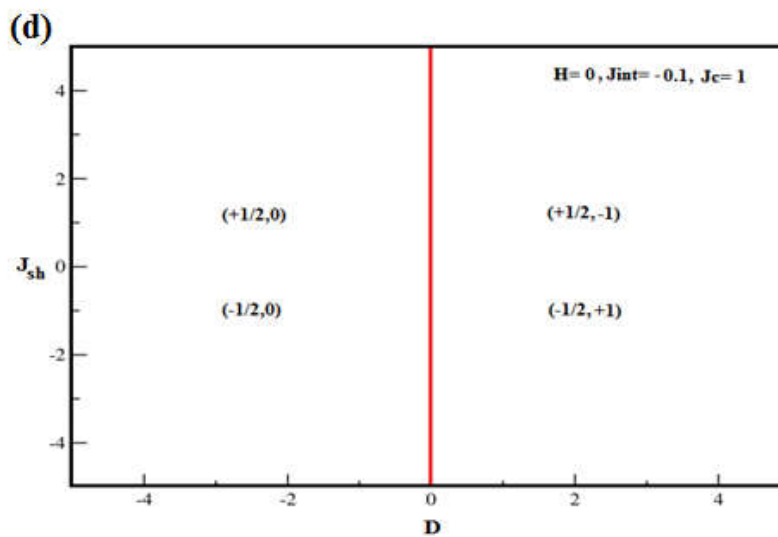
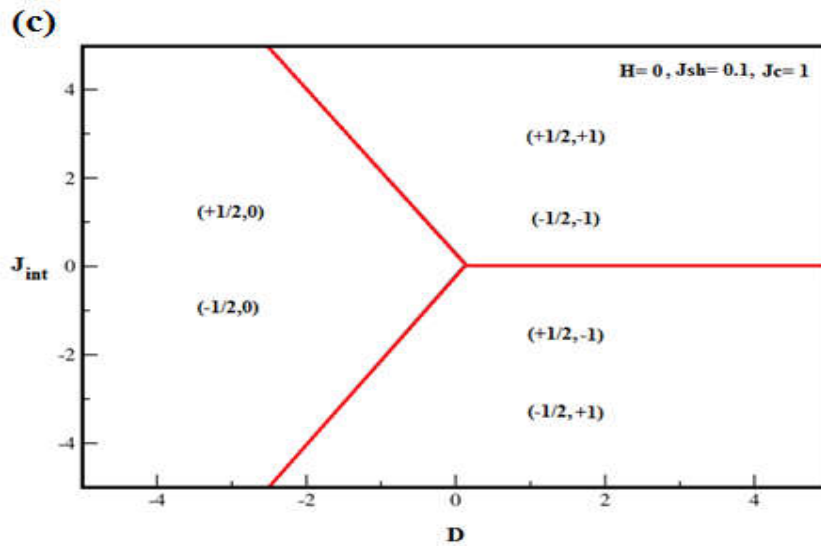
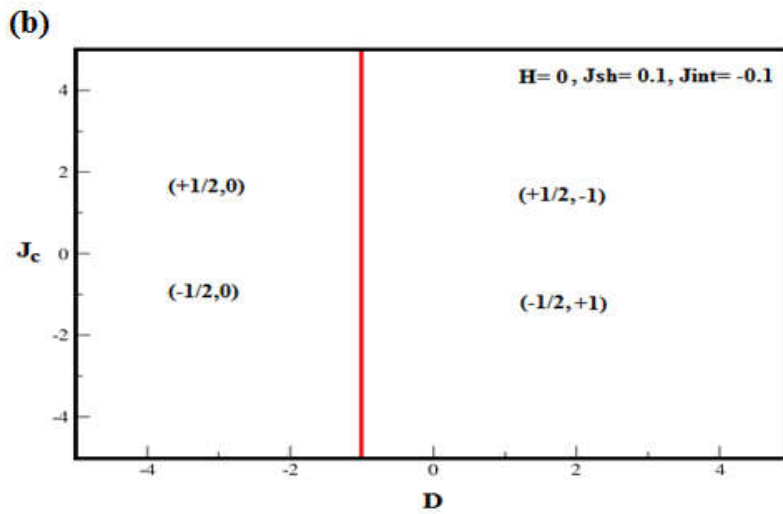


Figure V.5 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental d'un double fullerène. **(a)** Dans le plan (D, H) pour $J_c = 1, J_{sh} = 0.1$ et $J_{int} = -0.1$. **(b)** Dans le plan (D, J_c) pour $H = 0, J_{sh} = 0.1$ et $J_{int} = -0.1$. **(c)** Dans le plan (D, J_{int}) pour $H = 0, J_{sh} = 0.1$ et $J_c = 1$. **(d)** Dans le plan (D, J_{sh}) pour $H = 0, J_{int} = -0.1$ et $J_c = 1$.

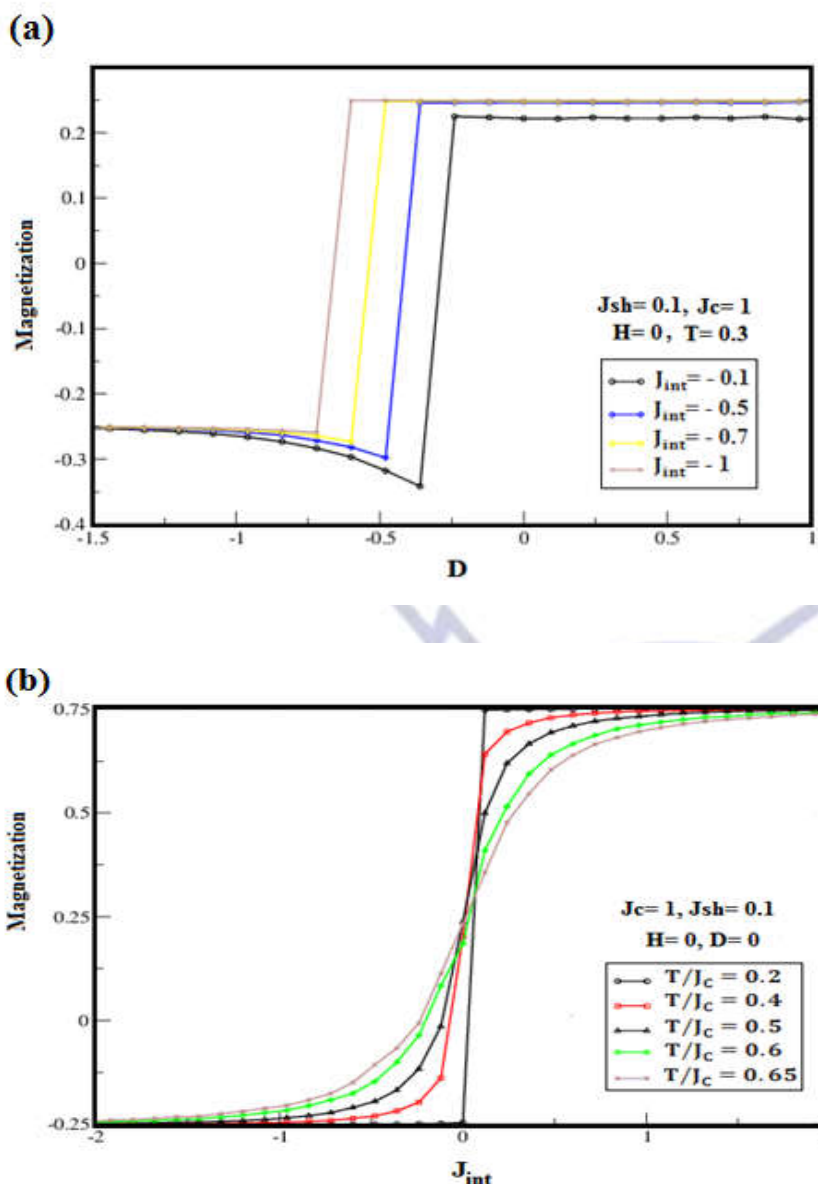
Discussions des diagrammes de phase :

Afin d'illustrer l'effet des interactions de couplage d'échange ($J_{int} = -0.1, J_{int} = -0.5, J_{int} = -0.7,$ et $J_{int} = -1$) sur le comportement du système étudié en absence du champ magnétique externe ($H = 0$), nous avons tracé sur la figure V.6 (a) le profil des aimantations en fonction du champ de cristal D sur le double fullerène étudiée. La figure V.6 (a) est tracée pour une valeur fixe de la température ($T = 0.3$ K) et des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{sh} = 0.1$ et $J_c = 1$. Nous avons trouvé que les couches du système étudié transitent simultanément montrant une transition du premier ordre. En effet, les profils des aimantations passent brutalement des valeurs négatives aux valeurs positives. Ce comportement se produit sous l'effet d'une valeur basse de la température. En effet, on retrouve toutes les transitions de l'état fondamental de tels systèmes qui sont de premier ordre à très basse températures. Par conséquent, l'effet du champ cristallin ne fait que modifier simultanément l'orientation et le signe des aimantations.

Pour examiner l'effet de l'augmentation de la température ($T/J_c = 0.2, T/J_c = 0.4, T/J_c = 0.5, T/J_c = 0.6$ et $T/J_c = 0.65$) sur le comportement du système étudié en absence du champ magnétique externe et du champ cristallin ($H = D = 0$), nous avons tracé sur la figure V.6 (b) le profil des aimantations en fonction des interactions de couplage d'échange J_{int} . Pour les valeurs fixes d'interactions de couplage d'échange: $J_c = 1$ et $J_{sh} = 0.1$, le comportement des aimantations est une transition du premier ordre pour les valeurs de la température ($T/J_c = 0.2$ et $T/J_c = 0.4$), alors que, ce comportement est une transition du second ordre pour les valeurs relativement élevées de la température ($T/J_c = 0.5, T/J_c = 0.6$ et $T/J_c = 0.65$).

Nous avons également étudié le comportement de compensation dans notre système. En effet, nous avons cherché l'existence de la température de compensation T_{comp} pour les valeurs fixes d'interactions de couplage d'échange: $J_c = 1, J_{sh} = 0.1$ et $J_{int} = -0.1$ en l'absence du

champ magnétique externe et du champ cristallin ($H = D = 0$). En fait, nous montrons sur la figure V.6 (c) le comportement des aimantations en fonction de la température. Nous avons trouvé sur cette figure une seule température de compensation ($T_{\text{comp}} \cong 0.5$ K). Aussi les aimantations de chaque couche s'annulent et se stabilisent pour $T \geq 0.75$ K.



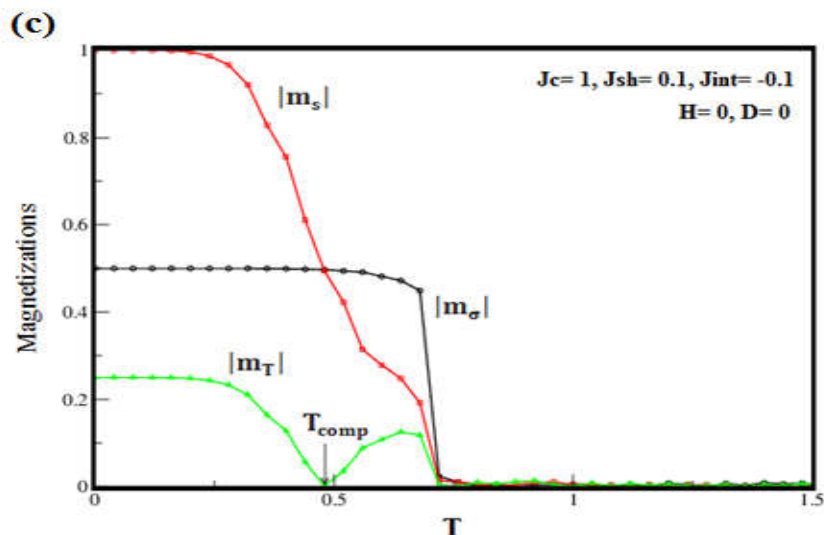


Figure V.6 : Variation des aimantations d'un double fullerène en fonction des paramètres du système: **(a)** Les aimantations en fonction du champ cristallin D pour: $J_{sh} = 0.1$, $J_c = 1$ et $H = 0$, $T = 0.3$ K avec $J_{int} = -0.1$, $J_{int} = -0.5$, $J_{int} = -0.7$, et $J_{int} = -1$, **(b)** Les aimantations en fonction d'interaction de couplage d'échange J_{int} pour: $J_c = 1$, $J_{sh} = 0.1$ et $H = D = 0$ avec $T/J_c = 0.2$, $T/J_c = 0.4$, $T/J_c = 0.5$, $T/J_c = 0.6$ et $T/J_c = 0.65$, **(c)** Les aimantations en fonction de la température T pour: $J_c = 1$, $J_{sh} = 0.1$ et $J_{int} = -0.1$ avec $D = H = 0$.

5.3 Etude d'un système des spins mixtes dans une structure fullerène $X_{30}Y_{30}$: (Article: J. of Low Temperature Physics, Vol. 192(1-2), (2018), 65-74.)

Dans ce travail, nous étudions les propriétés magnétiques d'un fullerène C_{60} formé d'une structure mixte $X_{30}Y_{30}$, avec les spins $S = 1$ et $\sigma = 1/2$ (voir Figure V.7). Dans un premier temps, nous élaborons les diagrammes de phase de l'état fondamental dans différents plans. Ensuite, nous étudions les effets des interactions de couplage d'échange J en l'absence/présence du champ magnétique externe H et du champ cristallin Δ , sur les différentes configurations possibles. En utilisant la méthode de Monte Carlo, nous avons

étudié les propriétés magnétiques de ce système, nous avons trouvé que la température critique T_c augmente lorsque l'on augmente les valeurs des interactions d'échange de couplage entre les spins. D'autre part, les valeurs du champ magnétique coercitif H_c augmentent lorsque l'on augmente les valeurs des interactions d'échange. Mais le champ H_c diminue lors de l'augmentation des valeurs de la température réduite.

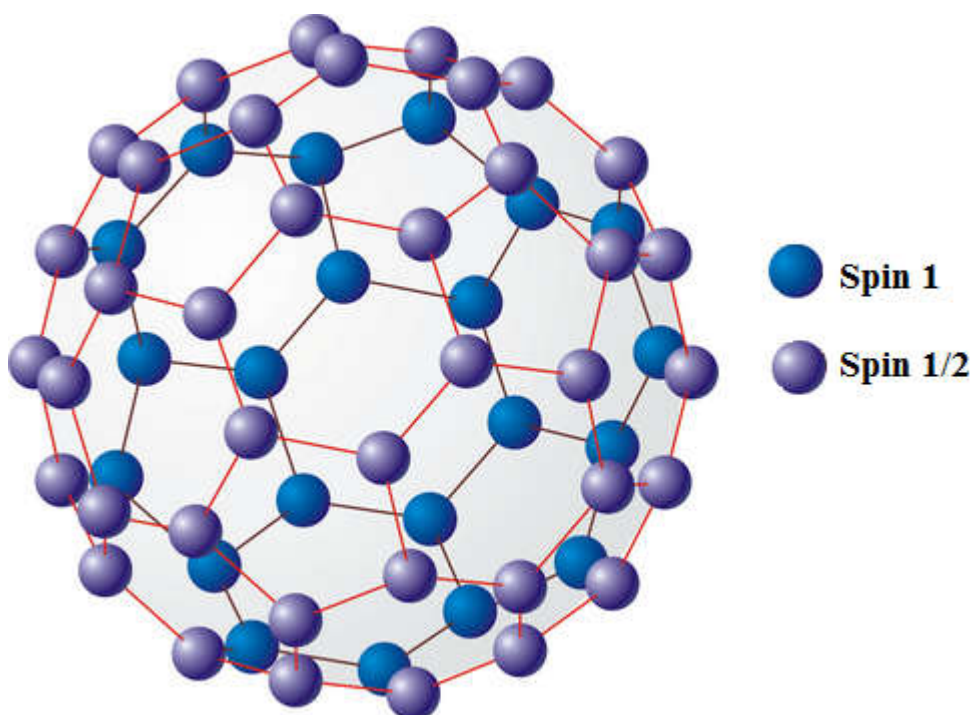


Figure V.7 : La géométrie d'un fullerène C_{60} correspondant à la structure mixte $X_{30}Y_{30}$, avec les spins $S = 1$ et $\sigma = 1/2$, respectivement.

Discussions des diagrammes de phase de l'état fondamental :

Dans ce travail, nous étudions les propriétés magnétiques du système étudié, pour une valeur nulle de température ($T = 0$). En effet, toutes les configurations possibles ($2 \times 3 = 6$) sont calculés et comparés dans les diagrammes de phase de l'état fondamental représentés sur les figures V.8 (a) et (b).

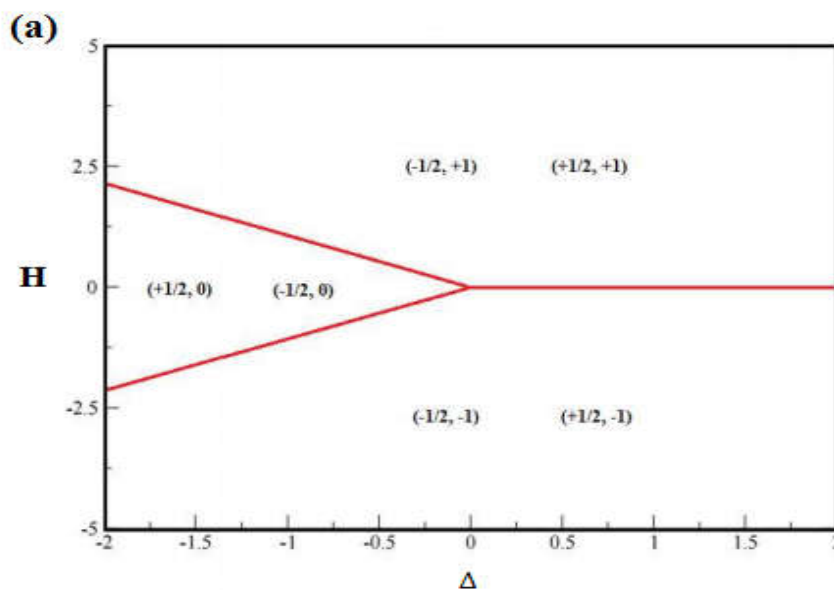
L'Hamiltonian qui décrit le système est donné par:

$$\mathcal{H} = -J_o \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_p \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_{int} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j - \Delta \sum_i S_i^2 - H (\sum_i \sigma_i + \sum_i S_i) \quad (V.3)$$

Avec : J_{int} désigne la constante d'interaction de couplage d'échange entre les spins σ et S . Alors que J_{σ} et J_p désignent la constante de couplage d'échange entre les spins $\sigma - \sigma$ et $S - S$ respectivement. H est le champ externe et Δ représente le champ cristallin agissant sur les S -spins du système.

En comparant les énergies des différentes configurations, nous avons trouvé dans le plan (Δ, H) six configurations stables, pour les valeurs fixes des interactions de couplage d'échange: $J_{\sigma} = J_s = J_{\text{int}} = 1$. Une symétrie parfaite est trouvée par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$. Les deux phases $(\pm 1/2, 0)$ trouvées pour les valeurs négatives du champ cristallin Δ disparaissent en laissant la place aux quatre phases $(\pm 1/2, \pm 1)$ dont deux phases sont stables pour les valeurs positives de H les deux autres sont stables dans la région où le champ magnétique externe H est négative, voir la figure V.8 (a).

Nous avons constaté que seulement deux phases stables sont trouvées dans le plan (J_{σ}, H) pour les valeurs fixes des interactions de couplage: $J_s = J_{\text{int}} = 1$. En outre, en absence du champ cristallin ($\Delta = 0$), une symétrie parfaite est trouvée par rapport au champ magnétique externe par rapport à l'axe $H = 0$, voir la figure V.8 (b).



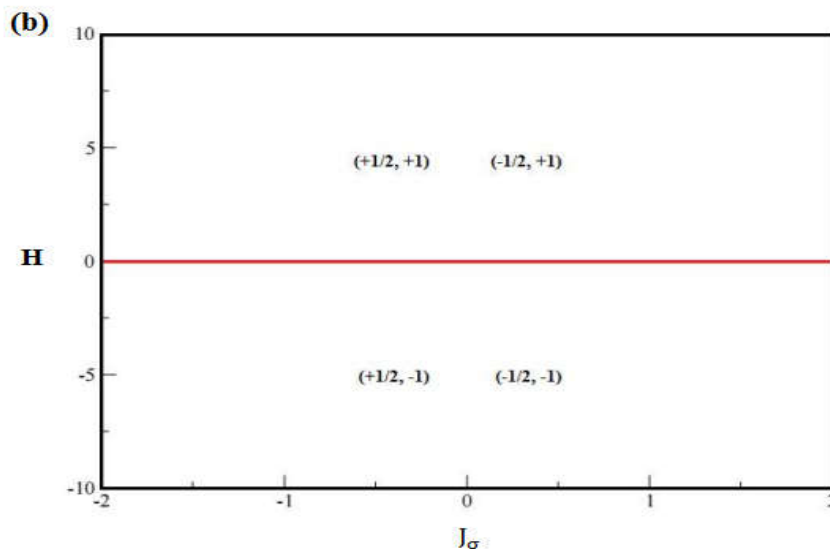


Figure V.8 : Les diagrammes de phase de l'état fondamental : **(a)** Dans le plan (Δ, H) pour: $J_\sigma = J_s = J_{int} = 1$, **(b)** Dans le plan (J_σ, H) pour : $J_s = J_{int} = 1$ et $\Delta = 0$.

Discussions des diagrammes de phase :

Dans cette partie, nous explorons les simulations de Monte Carlo pour étudier les comportements des aimantations totales m_t et des susceptibilités totales χ_t pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange : $J_{int} = J_c = 1$ et en absence du champ cristallin ($\Delta = 0$). On trace sur les figures V.9 (a) et (b) les comportements des aimantations totales m_t et des susceptibilités totales χ_t en fonction de la température T , respectivement, en variant la valeur d'interaction de couplage d'échange ($J_s = 0.01, J_s = 0.1, J_s = 0.5, J_s = 0.8$, et $J_s = 1$).

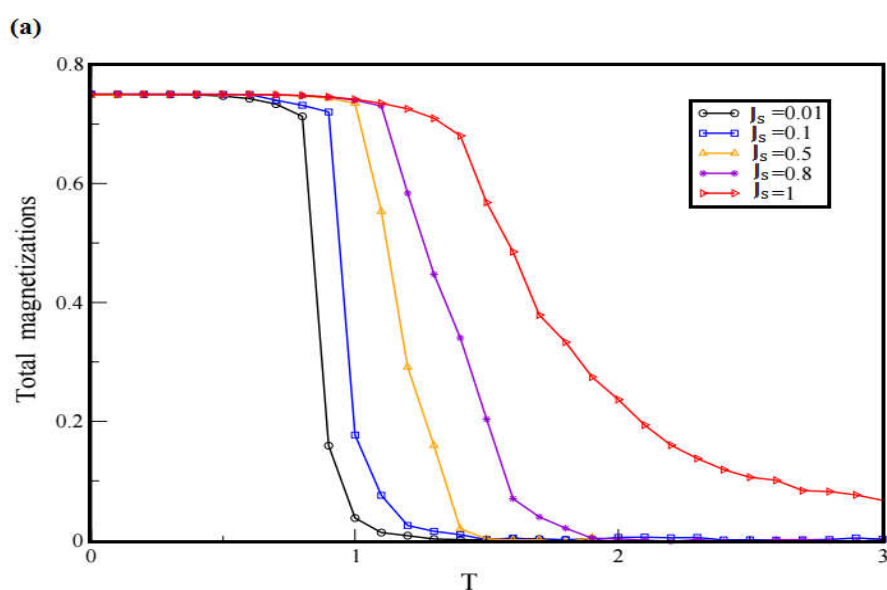
En absence des champs magnétique externe et cristallin ($H = \Delta = 0$) à basse température, l'aimantation totale subit une transition de second ordre qui se produit à la température critique T_c . Nous notons que cette température est augmentée en augmentant la valeur d'interaction de couplage d'échange J_s . D'autre part, chaque transition de l'aimantation entraîne un pic de susceptibilité. En rassemblant les résultats obtenus sur les figures V.9 (a) et (b), nous rapportons le comportement de la température critique T_c par rapport au couplage d'échange J_s . Un comportement linéaire brisé est observé.

En outre, pour inspecter les comportements des aimantations totales m_t en fonction du champ magnétique externe H pour une valeur fixe de la température $T = 0.3$ K en variant la valeur d'interaction de couplage d'échange ($J_s = 0.01, J_s = 0.1, J_s = 0.5, J_s = 0.8,$ et $J_s = 1$). Voir la figure V.9 (c).

Nous avons trouvé que le champ magnétique coercitif H_c augmente quand on augmente la valeur d'interaction de couplage d'échange J_s . Ce comportement est dû à une forte interaction de couplage entre les spins σ et S . Par conséquent, le système devient un matériau dur.

Pour examiner les comportements des aimantations totales m_t en fonction du champ magnétique externe H en variant la température ($T = 0.3$ K, $T = 0.5$ K, $T = 0.6$ K, $T = 0.7$ K, et $T = 1$ K) pour des valeurs fixes des interactions de couplage d'échange : $J_{int} = J_c = 1$ et $J_s = 0.5$. En absence de champ cristallin ($\Delta = 0$), nous avons constaté que le champ magnétique coercitif H_c diminue en augmentant la température. Voir la figure V.9 (d).

Nous avons constaté que la température critique T_c augmente lorsque l'on augmente les interactions d'échange de couplage. En outre, on constate que le champ magnétique coercitif H_c augmente lorsqu'on augmente les interactions d'échange de couplage et diminue lorsqu'on augmente la température T .



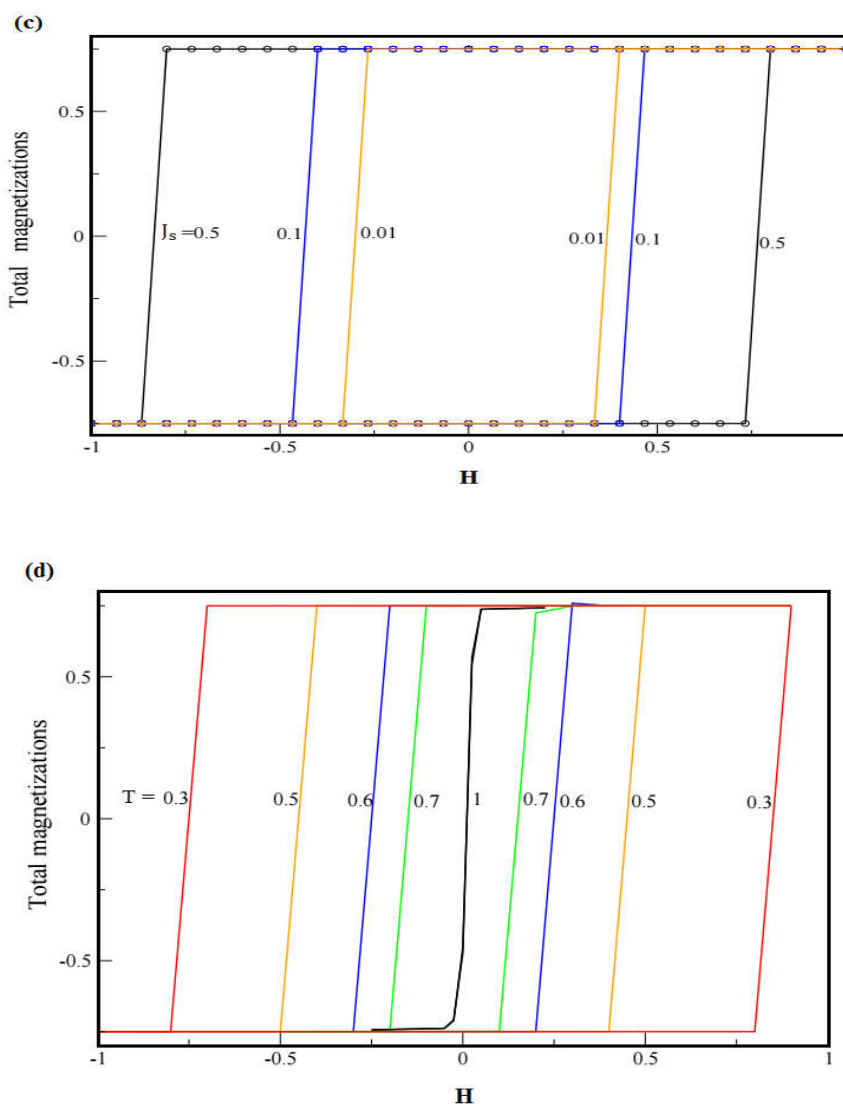
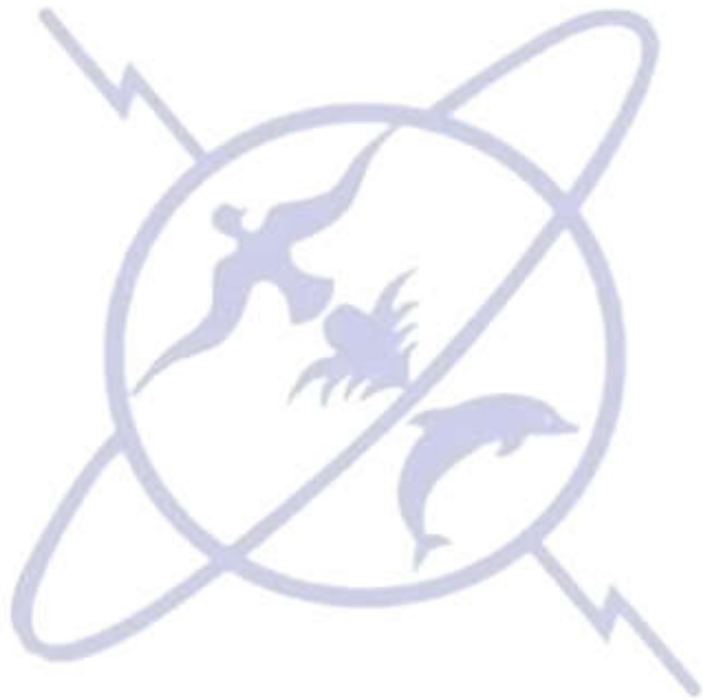


Figure V.9 : (a) Les aimantations totales en fonction de la température T pour : $J_{int} = J_c = 1$ et $H = \Delta = 0$, avec $J_s = 0.01$, $J_s = 0.1$, $J_s = 0.5$, $J_s = 0.8$, et $J_s = 1$, (b) Les susceptibilités totales en fonction de la température T pour : $J_{int} = J_c = 1$ et $H = \Delta = 0$, avec $J_s = 0.01$, $J_s = 0.1$, $J_s = 0.5$, $J_s = 0.8$, et $J_s = 1$, (c) Les aimantations totales en fonction de du champ magnétique externe H pour : $J_{int} = J_c = 1$, $T = 0.3$ K et $\Delta = 0$, avec $J_s = 0.01$, $J_s = 0.1$, $J_s = 0.5$, $J_s = 0.8$, et $J_s = 1$, (d) Les aimantations totales en fonction de du champ magnétique externe H pour : $J_{int} = J_c = 1$, $J_s = 0.5$ et $\Delta = 0$, avec $T = 0.3$ K, $T = 0.5$ K, $T = 0.6$ K, $T = 0.7$ K, et $T = 1$ K.



Conclusion générale et perspectives

L'évolution et la découverte de nouvelles propriétés magnétiques des matériaux nano-magnétiques ont été le fruit d'une riche coopération entre expérimentateurs et théoriciens. De nombreux concepts et applications sont nés de cette innovation. Aujourd'hui de nombreux défis s'ouvrent aux théoriciens et aux expérimentateurs : la compréhension de procédés magnétiques et le stockage de l'information à l'échelle nano-structurale. Motivé par cet acte et passionné par ce domaine de recherche bénéfique, ce travail de thèse a pu mettre en évidence de nombreux résultats originaux dont l'application de la méthode Monte Carlo pour étudier les propriétés magnétiques des nanomatériaux est le but de ce mémoire. Pour cela, une interprétation est proposée dans le cadre d'étudier la structure magnétique des nanomatériaux qui permet de dégager plusieurs phénomènes magnétiques.

Ce manuscrit contient cinq chapitres en plus d'une introduction et conclusion générales. Les trois derniers chapitres ont été consacrés à nos travaux de recherche et nos récents résultats obtenus dans ce domaine. En effet, ces études sont basées sur la manipulation des simulations de Monte Carlo dont les nanomatériaux sont les éléments radicaux de cette recherche. La conclusion générale présente un contenu riche des idées primordiales discutées et développées dans ce document.

Dernièrement, un immense effort a été consacré pour une compréhension profonde du comportement magnétique des nanomatériaux dans le but d'un grand investissement dans différents domaines. Ces nanomatériaux ont attiré une attention spéciale grâce à leurs technologies potentielles et leurs applications industrielles par l'émergence des nanotechnologies. A l'aide de la méthode de Monte Carlo, un nombre de propriétés et caractéristiques a pu prédire dans ces systèmes des phénomènes magnétiques et critiques. Cette approche a permis d'une manière simple et bien détailler de décrire les propriétés magnétiques des nanomatériaux.

Plusieurs études ont démontré les propriétés du ferromagnétique en nano-systèmes, dont les résultats trouvés sont très riches concernant le comportement critique, et aussi les phénomènes découverts sont très intéressants comme le mouillage magnétique et les transitions de couches à l'aide de cette technique qui a permis d'examiner l'influence des couplages, du champ magnétique externe et du champ cristallin.

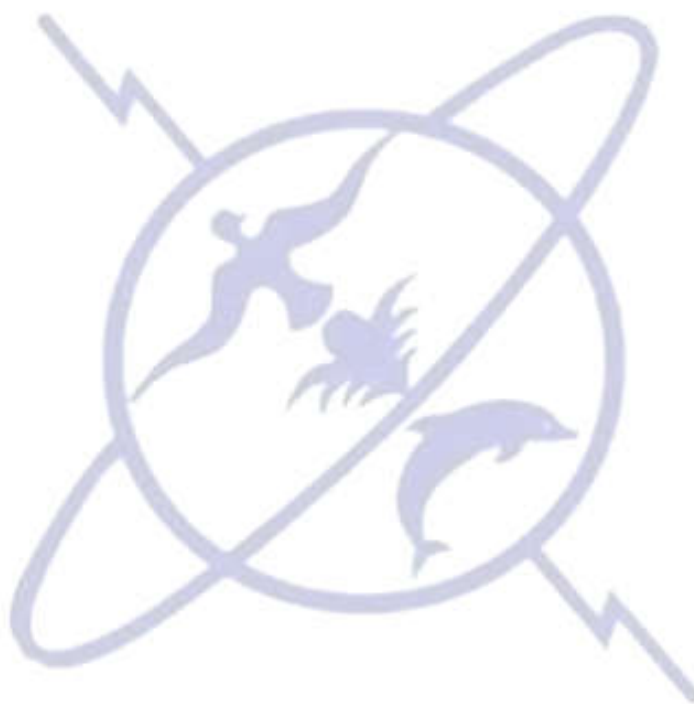
Les nanostructures magnétiques core/shell ont attiré une vaste attention grâce à leurs propriétés physiques et chimiques, même pour des nanostructures composées d'un système anti-ferri-magnétique, l'effet des interactions d'échange de couplage et du champ cristallin a aidé à analyser les comportements de certains paramètres tels que l'aimantation, les températures de compensation et critique. Alors que beaucoup de travaux ont focalisé leurs intérêts sur les couches alternatives des nanostructures dont les résultats peuvent montrer un comportement critique très intéressant en ces nanoparticules dans plusieurs phénomènes.

Pour favoriser le progrès de ce domaine de recherche, ce contexte a fait l'appel à l'un des nanomatériaux particuliers: la polyamidoamine dendrimère (PAMAM) qui se caractérise par une architecture commune dans les systèmes biologiques. La structure particulière des dendrimères a posé des questions de recherche dans plusieurs domaines scientifiques et médicaux. Dans ce cadre, l'état fondamental ainsi que les diagrammes de phase de cette nanostructure sont analysés pour étudier les propriétés magnétiques en vue de l'application des simulations de Monte Carlo. L'étude des aimantations est également entamée pour des valeurs différentes des températures de chaque couche. En outre, l'étude du comportement thermique des aimantations et des susceptibilités des fullerènes a permis de constater que la température critique augmente de façon non linéaire lorsque l'on augmente le nombre d'atomes dans les nanostructures étudiées. Tandis que le champ coercitif augmente linéairement lorsque le nombre d'atomes dans le système augmente.

D'un autre côté, ce mémoire de thèse a projeté des rayons de lumière sur des études très récentes dans le domaine en notant de nombreux résultats imprévus ainsi que des recherches abondantes à innover.

Le travail présenté ici montre encore une fois l'importance, mais aussi les limitations de l'expérimentation numérique dans l'étude des propriétés magnétiques. Il s'agit d'une technique puissante à mi-chemin entre la physique expérimentale et la physique théorique.

C'est une discipline qui joue le rôle d'intermédiaire, en permettant de dégager de nouveaux concepts pour les théoriciens et de suggérer de nouvelles expériences pour les expérimentateurs. En effet, de nombreuses études restent encore à effectuer sur ces idées primordiales. Cela lance de futures perspectives dont nous comptons poursuivre notre activité dans ce domaine de recherche. On souhaite aussi s'intéresser à manipuler d'autres méthodes de simulations ainsi que d'effectuer des études sur les propriétés structurales en relation avec les propriétés physiques dont les bénéfices améliorent toutes les frontières des technologies.



Bibliographie

- [1] R. Masrour, L. Bahmad, M. Hamedoun, A. Benyoussef, E.K. Hlil, Phys. Lett. A **378**, (2014) 276
- [2] H. Behera, G. Mukhopadhyay, AIP Conf. Proc. **1313**, (2010) 152
- [3] K.S. Novoselov *et al.*, Science **306**, (2004) 666
- [4] T. Suzuki, Y. Yokomizo, Phys. E. **42**, (2010) 481
- [5] A.K. Geim, K.S. Novoselov, Nat. Mater. **6**, (2007) 183
- [6] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, (2009) 109
- [7] K. Takeda, K. Shiraishi, Phys. Rev. B **68**, (1994) 14916
- [8] Y. Zhanget *al.*, Nature. **438**, (2005) 201
- [9] M.I. Katsnelson, Phys. Rev. B. **76**, (2007) 073411
- [10] RP. Feynman "Plenty of room at the bottom". December 1959
- [11] R. Masrour, L. Bahmad, M. Hamedoun, A. Benyoussef, E.K. Hlil, Phys. Lett. A **378**, (2014) 276
- [12] R.H. Kodama, J. Magn. Magn. Mater. **200**, (1999) 359
- [13] A. Fert, L. Piraux, J. Magn. Magn. Mater. **200**, (1999) 338
- [14] S. Ramesh, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett. **49**, (1982) 47
- [15] S. Ramesh, Q. Zhang, G. Torso, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett. **52**, (1984) 2375
- [16] M. Sutton, S.G.J. Mochrie, R.J. Birgeneou, Phys. Rev. Lett. **51**, (1983) 407

- [17] S.G.J. Mochrie, M. Sutton, R.J. Birgeneou, D.E. Moncton, P.M. Horn, Phys. Rev. B **30**, (1984) 263
- [18] S.K. Stija, L. Passel, J. Eckart, W. Ellenson, H. Patterson, Phys. Rev. Lett. **51**, (1983) 411
- [19] T. Tybell, C.H. Ahn, J.M. Triscone, Appl. Phys. Lett. **75**, (1999) 856
- [20] D.D. Fong, G.B. Stephenson, S.K. Streiffer, J.A. Eastman, O. Auciello, P.H. Fuoss, C. Thompson, Science **304**, (2004) 1650
- [21] J.J. Urban, W.S. Yun, Q. Gu, H. Park, J. Am. Chem. Soc. **124**, (2002) 1186
- [22] X.Y. Zhang, X. Zhao, C.W. Lai, J. Wang, X.G. Tang, J.Y. Dai, Appl. Phys. Lett. **85**, (2004) 4190
- [23] J.E. Spanier, A.M. Kolpak, J.J. Urban, I. Grinberg, L. Ouyang, W.S. Yun, A.M. Rappe, H. Park, Nano Lett. **6**, (2006) 735
- [24] Y. Yüksel, Ü. Akıncı, H. Polat, Phys. A **392**, (2013) 2347
- [25] T. Kaneyoshi, Phys. A **390**, (2011) 3697
- [26] Y. Luo, I. Szafraniak, N.D. Zakharov, V. Nagarajan, M. Steinhart, R.B. Wehrspohn, J.H. Wendorff, R. Ramesh, M. Alexe, Appl. Phys. Lett. **83**, (2003) 440
- [27] F.D. Morrison, L. Ramsay, J.F. Scott, J. Phys. Condens. Matter **15**, (2003) L527
- [28] Z. Fan, J.G. Lu, Int. J. High. Speed Electron. Syst. **16**, (2006) 883
- [29] Y.C. Sui, R. Skomski, K.D. Sorge, D.J. Sellmyer, Appl. Phys. Lett. **84**, (2004) 1525
- [30] A. Fert, L. Piraux, J. Magn. Magn. Mater **200**, (1999) 338
- [31] C. Alexiou, A. Schmidt, R. Klein, P. Hulin, C. Bergemann, W. Arnold, J. Magn. Magn. Mater **252**, (2002) 363
- [32] R.H. Kodama, J. Magn. Magn. Mater **200**, (1999) 359
- [33] H. Zeng, J. Li, J.P. Liu, Z.L. Wang, S. Sun, Nat. Lond. **420**, (2002) 395

- [34] J. A. Tuszynski, M. F. Jorgensen, and D. Mobius, *Phys. Rev. E* **59**, (1999) 4374
- [35] P. Hodge, *Polymer science branches out. Nature* **362**, (1993) 18
- [36] C.J. Hawker, J.M.J. Frechet. *J. Am. Chem. Soc.* **32**, (1990) 7638
- [37] D. Luo and W. M. Saltzman, *Nature Biotechnol.* **18**, (2000) 33
- [38] D. A. Tomalia, H. Baker, J. Dewalk, M. Hall, G. Kallos, S. Martin, J. Roeck, J. Ryder, P. Smith. *Polymer Journal* **17**, (1985) 117
- [39] D.A. Tomalia. *Prog. Polym. Sci.* **30**, (2005) 294
- [40] J. Wang, J. Chen, X. Jia, X. W. Cao, M. Li, *Chem. Commun.* (2000) 511
- [41] Lin, W. Galletto, P. Borkovec, M. Langmuir **20**, (2004) 7465
- [42] D.A. Tomalia, *Nanomedicine* **7**, (2012) 953
- [43] D.A. Tomalia, J.B. Christensen, U. Boas. *Dendrimers, dendrons, and dendritic polymers: discovery, applications, and the future.* New York: Cambridge University Press; (2012)
- [44] Y. Cheng, L. Zhao, Y. Li, T. Xu, *Chem. Soc. Rev.* **40**, (2011) 2673
- [45] D.M. Watkins, Y. Sayed-Sweet, J.W. Klimash, N.J. Turro, D.A. Tomalia, *Langmuir* **13**, (1997) 3136
- [46] Y. Cheng, L. Zhao, T. Li, *Dendrimer-surfactant interactions, Soft Matter* **10**, (2014) 2714
- [47] F. Zeng, S.C. Zimmerman, *Chem. Rev.* **97**, (1997) 1681
- [48] D.A. Tomalia, A.M. Naylor, W.A. Goddard III, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **29**, (1990) 138
- [49] Pedro M. R. Paulo, José N. Canongia Lopes, Sílvia M. B. Costa, *J. Phys. Chem. B* **111**, (2007) 10651
- [50] B. Buhlein, W. Wehner, F. Voegtle, *Synthesis* **155**, (1978)
- [51] D.A. Tomalia, H. Baker, J.R. Dewald, M. Hall, G. Kallos, S. Martin, J. Roeck, J. Ryder, P. Smith, *Polym. J. (Tokyo)* **17**, (1985) 117

- [52] Frechet and Tomalia. Wiley Series in Polymer Science. Wiley, New York, first edition, (2001)
- [53] K. Takeda, K. Shiraishi, Phys. Rev. B **68**, 50 (1994) 14916
- [54] Y. Zhang, *et al.*, Nature. **438**, (2005) 201
- [55] T. Suzuki, Y. Yokomizo, Phys. E. **42**, (2010) 481
- [56] K.S. Novoselov, *et al.*, Science **306**, (2004) 666
- [57] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, (2009) 109
- [58] M.I. Katsnelson, Phys. Rev. B. **76**, (2007) 073411
- [59] H. Behera, G. Mukhopadhyay, AIP Conf. Proc. **1313**, (2010) 152
- [60] A.K. Geim, K.S. Novoselov, Nat. Mater. **6**, (2007) 183
- [61] M. Drillon, E. Coronado, D. Beltran, R. Georges, J. Chem. Phys. **79**, (1983) 449
- [62] D. Kechrakos, K.N. Trohidou, J. Magn. Magn. Mater. **226**, (2004) 261
- [63] V. Skumryev, S. Stoyanov, Y. Zhang, G.C. Hadjipanayis, D. Givord, J. Nogués, Nature **423**, (2003) 850
- [64] J. Bansmann, S.H. Baker, C. Binns, J.A. Blackman, J.-P. Bucher, J. Dorantes-Davila, V. Dupuis, L. Favre, D. Kechrakos, A. Kleibert, K.-H. Meiwes-Broer, G.M. Pastor, A. Perez, O. Toulemonde, K.N. Trohidou, J. Tuailon, Y. Xie, Surf. Sci. Rep. **56**, (2005) 189
- [65] C. Frandsen, C.W. Ostefeld, M. Xu, C.S. Jacobsen, L. Keller, K. Lefmann, S. Morup, Phys. Rev. B **70**, (2004) 134416
- [66] H. Kachkachi, J. Magn. Magn. Mater. **316**, (2007) 248
- [67] J. Nogués, J. Sort, V. Langlais, S. Doppiu, B. Dieny, J.S. Munoz, S. Surinach, M.D. Baro, S. Stoyanov, Y. Zhang, Int. J. Nanotechnol. **2**, (2005) 23
- [68] M. Grimsditch, P. Loubeyre, A. Polian, Phys. Rev. B. **33**, (1986) 7192

- [69] D.F. Styer, M.K. Phani, J.L. Lebowitz, Phys. Rev. B. **34**, (1986) 3361
- [70] H.L. Scott, Phys. Rev. A. **37**, (1988) 263
- [71] J.A. Barker, Phys. Rev. Lett. **57**, (1986) 230
- [72] Z. Onyszkiewicz, Phys. Lett. A. **68**, 2939 (1978) 113
- [73] X. Zhang, S. Mizukami, Q. Ma, T. Kubota, M. Oogane, H. Naganuma, Y. Ando, T. Miyazaki, J. Appl. Phys. **115**, (2014) 172608
- [74] M. Gobbi, F. Golmar, R. Llopis, F. Casanova, L. E. Hueso, Adv. Mater. **23**, (2011) 1609
- [75] T. Tran, T. Q. Le, J. G. Sanderink, W. G. van der Wiel, M. P. de Jong, Adv. Funct. Mater. **22** (2012) 1180
- [76] X. Zhang, S. Mizukami, T. Kubota, Q. Ma, M. Oogane, H. Naganuma, Y. Ando, T. Miyazaki, Nat. Commun. **4**, (2013) 1392
- [77] K. Yoshida, I. Hamada, S. Sakata, A. Umeno, M. Tsukada, K. Hirakawa, Nano Lett. **13**, (2013) 481
- [78] D. M. Guldi, B. M. Illescas, C. M. Atienza, M. Wielopolskia, N. Martin, Chem. Soc. Rev. **38**, 2939 (2009) 1587
- [79] W. W. Pai, C. L. Hsu, M. C. Lin, K. C. Lin, T. B. Tang, Phys. Rev. B **69**, (2004) 125405
- [80] M. Stengel, A. D. Vita, A. Baldereschi, Phys. Rev. Lett. **91**, (2003) 166101
- [81] B. Deviren, Y. S. ener, J. Magn. Magn. Mater **386**, (2015) 12
- [82] S.A. Mazen, T.E. Whalt, J. Magn. Magn. Mater **43**, (2013) 221
- [83] Li-Mei Liu, Wei Jiang, Zan Wang, Hong-Yu Guan, An-Bang Guo, J. Magn. Magn. Mater **324**, (2012) 4034
- [84] A. Zaim, M. Kerouad, M. Boughrara, J. Solid State Commun. **158**, (2013) 76
- [85] W. Jiang, Xiao-XI. Li, Li-Mei Lui, J. Phys. E **53**, (2013) 29
- [86] A. Zaim, M. Kerouad, J. Phys. A **389**, (2010) 3435

- [87] M. Vasilakaki, K.N. Trohidou, Phys. Rev. B **79**, (2009) 144402
- [88] T. Kaneyoshi, Solid State Commun. **151**, (2011) 1528
- [89] T. Kaneyoshi, J. Magn. Magn. Mater **323**, (2011) 1145
- [90] O. Canko, A. Erdinç, F. Taskın, A.F. Yıldırım, J. Magn. Magn. Mater **324**, (2012) 508
- [91] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Solid State Commun. **241**, (2016) 14,
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2016.05.003>
- [92] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, J. Supercond. Nov. Magnetism (2016) 1-7,
<http://dx.doi.org/10.1007/s10948-016-3577-0>
- [93] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, J. Supercond. Nov. Magnetism (2016),
<http://dx.doi.org/10.1007/s10948-016-3712-y>
- [94] M. Kovylyna, M. García del Muro, Z. Konstantinovic, M. Varela, O. Iglesias, A. Labarta, X. Batlle, Nanotechnology **20**, (2009) 175702
- [95] M. Vasilakaki, K.N. Trohidou, Phys. Rev. B **79**, (2009) 144402
- [96] S. Ramesh, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett **49**, (1982) 47
- [97] S. Ramesh, Q. Zhang, G. Torso, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett **52**, (1984) 2375
- [98] M. Sutton, S.G.J. Mochrie, R.J. Birgeneou, Phys. Rev. Lett. **51**, (1983) 407
- [99] S.G.J. Mochrie, M. Sutton, R.J. Birgeneou, D.E. Moncton, P.M. Horn, Phys. Rev. B **30**, (1984) 263
- [100] S.K. Stija, L. Passel, J. Eckart, W. Ellenson, H. Patterson, Phys. Rev. Lett **51**, (1983) 411
- [101] A.B. Harris, C. Micheletti, J. Yeomans, J. Stat. Phys **84**, (1996) 323
- [102] A. Zaim, M. Keroud, M. Boughrara, J. Magn. Magn. Mater. **331**, (2013) 37
- [103] M. Keskin, N. Sarli, B. Deviren, Solid State Commun. **151**, (2011) 1025
- [104] T.O. Wehling, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein, Appl. Phys. Lett. **93**, (2008) 202110

- [105] B.C. Wood, S.Y. Bhide, D. Dutta, V.S. Kandagal, A.D. Pathak, S.N. Punnathanam, K.G. Ayappa, S. Narasimhan, J. Chem. Phys. **137**, (2012) 054702
- [106] T. Kaneyoshi, Phys. B **414**, (2013) 72
- [107] V.S. Leite, W. Figueiredo, Physica A **350**, (2005) 379
- [108] T. Kaneyoshi, J. Magn. Magn. Mater. **321**, (2009) 3430
- [109] O. Iglesias, X. Batlle, A. Labarta, Phys. Rev. B **72**, (2005) 212401
- [110] Y. Yuksel, E. Aydiner, H. Polat, J. Magn. Magn. Mater. **323**, (2011) 3168
- [111] M. Vasilakaki, K.N. Trohidou, Phys. Rev. B **79**, (2009) 144402
- [112] R. Masrour, L. Bahmad, M. Hamedoun, A. Benyoussef, E.K. Hlil, Solid State Commun. **162**, (2013) 53–56
- [113] N. Nagaosa, Science **275**, (1997) 1078
- [114] O. Canko, A. Erdinç, F. Taşkın, M. Atış, Phys. Lett. A **375**, (2011) 3547
- [115] T. Kaneyoshi, J. Magn. Magn. Mater. **322**, (2010) 3410
- [116] T. Kaneyoshi, J. Magn. Magn. Mater. **322**, (2010) 3014
- [117] M. Keskin, N. Sarli, B. Deviren, Solid State Commun. **151**, (2011) 1025
- [118] Ü. Akıncı, Y. Yüksel, E. Vatanserver, H. Polat, Physica A **391**, (2012) 5810
- [119] Ü. Akıncı, J. Magn. Magn. Mater. **324**, (2012) 3951
- [120] W. Jiang, X.-X. Li, A.-B. Guo, H.-Y. Guan, Z. Wang, K. Wang, J. Magn. Magn. Mater. **355**, (2014) 309
- [121] A. Ferouan, A. Zaim, M. Kerouad, Physica B **445**, (2014) 74–80
- [122] Y. Yüksel, E. Aydiner, H. Polat, J. Magn. Magn. Mater. **323**, (2011) 3168
- [123] Y. Yüksel, E. Vatanserver, H. Polat, J. Phys. Condens. Matter **24**, (2012) 436004
- [124] E. Vatanserver, H. Polat, J. Magn. Magn. Mater. **343**, (2013) 221

- [125] S. Naji, A. Belhaj, H. Labrim, L. Bahmad, A. Benyoussef, A. ElKenz, *Physica A* **399**, (2014) 106
- [126] S. Naji, A. Belhaj, H. Labrim, L. Bahmad, A. Benyoussef, A. ElKenz, *Acta Phys. Pol. Ser. B* **45**, (2014) 947
- [127] D. García-Pablos, P. García-Mochales, N. García, P.A. Serena, *J. Appl. Phys.* **79**, (1997) 6019
- [128] H.L. Richards, M.A. Novotny, P.A. Rikvold, *Phys. Rev. B* **54**, (1996), 4113
- [129] C. Kittel, *Rev. Mod. Phys.* **21**, (1949) 541
- [130] C.B. Bean, J.D. Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, (1959) 120
- [131] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, (1965), 3892
- [132] C. Domb, D.L. Hunter, *Proc. Phys. Soc.* **86**, (1965), 1147
- [133] A.Z. Patashinskii, V.L. Prokovskii, *Sov. Phys. JETP* **23**, (1966), 292
- [134] C. Dasgupta, B.I. Halperin, *Phys. Rev. Lett.* **47**, (1981), 1556
- [135] P. Olsson, S. Teitel, *Phys. Rev. Lett.* **80**, (1998), 1964
- [136] V.L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **32**, (1971), 493
- [137] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, (1973), 118
- [138] M. Bander, D.L. Mills, *Phys. Rev. B* **38**, (1988), 12015
- [139] S.T. Bramwell, P.C.W. Holdsworth, *J. Phys. Cond. Mat.* **5**, (1993), L53
- [140] D. Hinzke, U. Nowak, *Phys. Rev. B* **58**, (1998), 265
- [141] D. Hinzke, U. Nowak, *Comp. Phys. Com.* **121&122**, (1999), 334
- [142] B. A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis*, World Scientific, 2004
- [143] Maiti P K, Çağın T, Wang G and Goddard W A III 2004 *Macromolecules* **37**, 6236

- [144] Sadanobu J and Goddard W A 1997 J. Chem. Phys. **106**, 6722
- [145] Rapaport D C 2004 The Art of Molecular Dynamics Simulation 2nd edn (New York: Cambridge)
- [146] Frenkel D and Smit B 1996 Understanding Molecular Simulation (San Diego: Academic)
- [147] D. P. Landau et K. Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, 2009
- [148] M. E. J. Newman, G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statical Physics, Oxford University press, 2002
- [149] M. E. JNewman, G. T. Barkem, Monte Carlo Methods in Statical Physics (Oxford: Clarendon Press 1999)
- [150] N. Metropolis, A.E. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, (1953), 1087
- [151] A. B. Bortz, M. H. Kalos, J. L. Lebowitz, Journal of Chemical Physics **17**, (1975), 10
- [152] W. Krauth, Statistical Mechanics Algorithms and Computations, Oxford University Press, 2006
- [153] V. Courtier, Réduction de modèle et simplification de l'intégration de loi de comportement pour la prévision de la durée de vie, thèse de doctorat, 83, (2013)
- [154] W. S. Kendall, F. Liang, J. S. Wang, Markov Chain Monte Carlo Innovations and Applications, World Scientific Publishing, (2005)
- [155] O. Cappé, A. Guillin, J.M. Marin, C.P. Robert, J. Comput. Graph. Statist. **13**, (2005), 907
- [156] W. Greiner, L. Neise, H. Stocker, Thermodynamics and Statistical Mechanics, Springer, 1997
-

- [157] T. Guénault, Statistical Physics, Springer, 2007
- [158] F. Jędrzejewski, Modèles Aléatoires et Physique Probabiliste, Springer, 2009
- [159] J. S. Blundell et K. M. Blundell, Concepts in Thermal Physics, Oxford University Press, 2008
- [160] A. L. Bernard, M. A. Guedeau-Boudeville, L.Jullien, J. M. di Meglio, Europhys. Lett. **34**, (1999), 101
- [161] P. G. de Gennes, F. Brochard-Wyart, D. Quéré, Chapitre 1 Capillarité : interfaces mobiles, Chapitre 9 Interfaces spéciaux, Gouttes, bulles, perles et ondes Belin (2002)
- [162] J. Cardy (1996), Scaling and Renormalization in Statistical Physics (Cambridge University Press, Cambridge, 1996), chap. 8
- [163] P.W. Mitchell, R.A. Cowley, H. Yoshizawa, P. B'oni, Y.J. Uemura, R.J. Birgenau, Phys. Rev. **B 34**, (1986), 4719
- [164] Vik.S. Dotsenko, Vl.S. Dotsenko, Sov. Phys. JETP Lett. **33**, (1981), 37
- [165] Vik.S. Dotsenko, Vl.S. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, (1983), 129
- [166] B.N. Shalaev, Sov. Phys. Solid State **26**, (1984), 1811
- [167] B.N. Shalaev, Phys. Rep. **237**, (1994), 129
- [168] R. Shankar, Phys. Rev. Lett. **58**, (1987), 2466
- [169] R. Shankar, Phys. Rev. Lett. **61**, (1988), 2390
- [170] A.W.W. Ludwig, Phys. Rev. Lett. **61**, (1988), 2388
- [171] A.W.W. Ludwig, Nucl. Phys. **B 330**, (1990), 639
- [172] K. Ziegler, Nucl. Phys. **B 344**, (1990), 499
- [173] M. Picco, Phys. Rev. Lett. **79**, (1997), 2998
- [174] J. Cardy, J.J. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. **79**, (1997), 4063

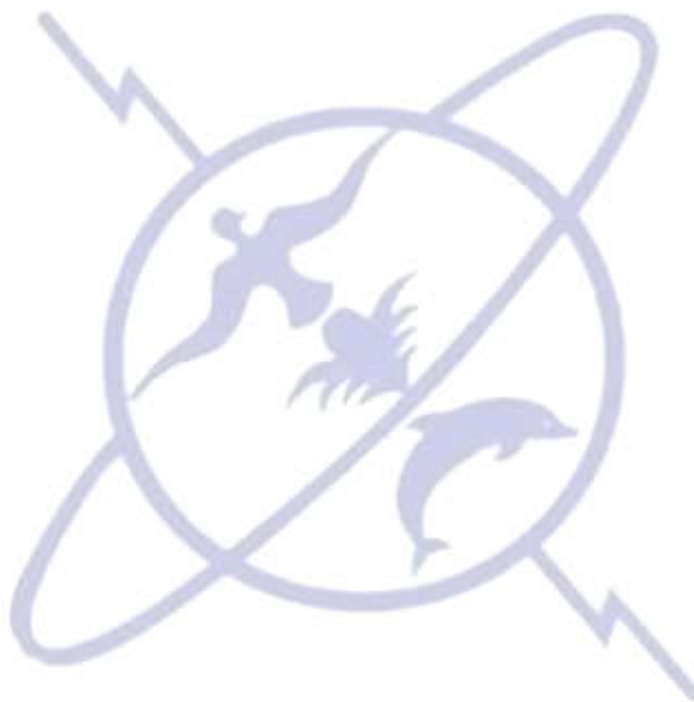
- [175] J.J. Jacobsen, J. Cardy, Nucl. Phys. **B 515**, (1998), 701
- [176] F.D.A. Aarão Reis, S.L.A. de Queiroz, R.R. dos Santos, Phys. Rev. **B 56**, (1997), 6013
- [177] D. Stauffer, F.D.A. Aarão Reis, S.L.A. de Queiroz, R.R. dos Santos, Int. J. Mod. Phys. **C 8**, (1997), 1209
- [178] S. Chen, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau, Phys. Rev. **E 52**, (1995), 1377
- [179] C. Chatelain, B. Berche, Phys. Rev. Lett. **80**, (1998), 1670
- [180] M. Picco, preprint cond-mat/9802092 (1998)
- [181] V.B. Andreichenko, V.I.S. Dotsenko, W. Selke, J. S. Wang, Nucl. Phys. **B 344**, (1990), 531
- [182] J.S. Wang, W. Selke, V.I.S. Dotsenko, V.B. Andreichenko, Europhys. Lett. **11**, (1990), 301
- [183] J. S. Wang, W. Selke, V.I.S. Dotsenko, V.B. Andreichenko, Physica **A164**, (1990), 221
- [184] W. Selke, in: Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics IV , eds. D.P. Landau, K.K. Mon, and H. B. Schüttler (Springer, Berlin, 1993), p. 183
- [185] W. Selke, Phys. Rev. Lett. **73**, (1994), 3487
- [186] A.L. Talapov, L.N. Shchur, J. Phys. Condens. Matter **6**, (1994), 8295
- [187] W. Selke, F. Szalma, P. Lajkó, F. Iglói, J. Stat. Phys. **89**, (1997), 1079
- [188] W. Selke, L.N. Shchur, O.A. Vasilyev, Physica **A 259**, (1998), 388
- [189] A. Roder, J. Adler, W. Janke, Phys. Rev. Lett. **80**, (1998), 4697
- [190] A. Roder, J. Adler, W. Janke, Physica **A 265**, (1999), 28
- [191] S. Wiseman, E. Domany, Phys. Rev. **E 51**, (1995), 3074
- [192] S. Wiseman, E. Domany, Phys. Rev. **E 52**, (1995), 3469
- [193] A. Aharony, A. B. Harris, Phys. Rev. Lett. **77**, (1996), 3700

- [194] J. Crangle, Solid-State Magnetism, Springer, 2012
- [195] R. Thompson, Environmental magnetism, Springer, 2012
- [196] K. H. J. Buschow et F. R. de Boer, Physics of Magnetism and Magnetic Materials, New York : Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2003
- [197] C. Stefanita, Magnetism Basics and Applications, Springer, 2012
- [198] M.R. Forrer, J. de Phys., **7**, (1926), 109
- [199] F. Preisach, Ann. Physik, **3**, (1929), 737
- [200] K.J. Sixtus, L. Tonks, Phys. Rev., **37**, (1931), 930
- [201] F. Bloch, Z. Phys., **74**, (1932), 295
- [202] L.D. Landau, E. Lifshitz, Phys. Z. Sowjetunion, **8**, (1935), 153
- [203] J. M. D. Coey, Magnetism and Magnetic Materials, Cambridge University Press, 2010
- [204] F. Paolo, Networks and Devices Using Planar Transmission Lines, CRC Press, 2000
- [205] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, J. of Mater. Res. Express **3**, (2016), 106104
- [206] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, J. of Supercond. Nov. Magn. **29**, (2016), 2261-7
- [207] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, J. of Mater. Res. Express **4**, (2017), 026102
- [208] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, J. of Solid State Communications **267**, (2017), 57-62
- [209] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, J. of Supercond. Nov. Magn. (2016), DOI 10.1007/s10948-016-3867-6
- [210] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, (Accepted in J. of Low Temperature Physics (2018))
- [211] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, (Article: Travail soumis pour publication) (2017)

- [212] K. Takeda, K. Shiraishi, Phys. Rev. B 68, **50**, (1994), 14916
- [213] Y. Zhang *et al.* Nature. **438**, (2005), 201
- [214] T. Suzuki, Y. Yokomizo, Phys. E. 42 (2010) 481
- [215] K.S. Novoselov *et al.*, Science **306**, (2004), 666
- [216] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, (2009), 109
- [217] M.I. Katsnelson, Phys. Rev. B. **76**, (2007), 073411
- [218] H. Behera, G. Mukhopadhyay, AIP Conf. Proc. **1313**, (2010), 152
- [219] A.K. Geim, K.S. Novoselov, Nat. Mater. **6**, (2007) ,183
- [220] M. Drillon, E. Coronado, D. Beltran, R. Georges, J. Chem. Phys. **79**, (1983), 449
- [221] D. Kechrakos, K.N. Trohidou, J. Magn. Magn. Mater. **226**, (2004), 261
- [222] V. Skumryev, S. Stoyanov, Y. Zhang, G.C. Hadjipanayis, D. Givord, J. Nogués, Nature **423**, (2003), 850
- [223] J. Bansmann, S.H. Baker, C. Binns, J.A. Blackman, J.-P. Bucher, J. Dorantes Davila, V. Dupuis, L. Favre, D. Kechrakos, A. Kleibert, K.-H. Meiwes-Broer, G.M. Pastor, A. Perez, O. Toulemonde, K.N. Trohidou, J. Tuaille, Y. Xie, Surf. Sci. Rep. **56**, (2005), 189
- [224] C. Frandsen, C.W. Ostefeld, M. Xu, C.S. Jacobsen, L. Keller, K. Lefmann, S. Morup, Phys. Rev. B **70**, (2004), 134416
- [225] H. Kachkachi, J. Magn. Magn. Mater. **316**, (2007), 248
- [226] J. Nogués, J. Sort, V. Langlais, S. Doppiu, B. Dieny, J.S. Munoz, S. Surinach, M.D. Baro, S. Stoyanov, Y. Zhang, Int. J. Nanotechnol. **2**, (2005), 23
- [227] D.A. Tomalia. Prog. Polym. Sci. 30, (2005) 294
- [228] D.A. Tomalia, Nanomedicine **7**, (2012) 953

- [229] D.A. Tomalia, J.B. Christensen, U. Boas. Dendrimers, dendrons, and dendritic polymers: discovery, applications, and the future. New York: Cambridge University Press; (2012)
- [230] Y. Cheng, L. Zhao, Y. Li, T. Xu, Chem. Soc. Rev. **40**, (2011) 2673
- [231] Y. Cheng, L. Zhao, T. Li, Dendrimer-surfactant interactions, Soft Matter **10**, (2014) 2714
- [232] F. Zeng, S.C. Zimmerman, Chem. Rev. **97**, (1997), 1681
- [233] D.A. Tomalia, A.M. Naylor, W.A. Goddard III, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **29**, (1990) 138
- [234] Pedro M. R. Paulo, José N. Canongia Lopes, and Sílvia M. B. Costa, J. Phys. Chem. B **111**, (2007) 10651
- [235] B. Buhlein, W. Wehner, F. Voegtle, Synthesis **155**, (1978)
- [236] D.A. Tomalia, H. Baker, J.R. Dewald, M. Hall, G. Kallos, S. Martin, J. Roeck, J. Ryder, P. Smith, Polym. J. (Tokyo) **17**, (1985) 117
- [237] Frechet and Tomalia. Wiley Series in Polymer Science. Wiley, New York, first edition, (2001)
- [238] K. Yoshida, I. Hamada, S. Sakata, A. Umeno, M. Tsukada, K. Hirakawa, Nano. Lett. **13**, (2013), 481
- [239] D. M. Guldi, B. M. Illescas, C. M. Atienza, M. Wielopolskia, N. Martin, Chem. Soc. Rev. **38**, (2009), 1587
- [240] X. Zhang *et al.* Nat. Commun. **4**, (2013), 1392
- [241] M. Gobbi, F. Golmar, R. Llopis, F. Casanova, L. E. Hueso, Adv. Mater **23**, (2011), 1609
- [242] T. Tran, T. Q. Le, J. G. Sanderink, W. G. van der Wiel, M. P. de Jong, Adv. Funct. Mater **22**, (2012), 1180

- [243] X. Zhang *et al.*, J. Appl. Phys. **115**, (2014), 172608
- [244] X. Zhang, S. Mizukami, Q. Ma, T. Kubota, M. Oogane, H. Naganuma, Y. Ando, and T. Miyazaki, J. Appl. Phys. **115**, (2014), 172608
- [245] K. Yoshida, I. Hamada, S. Sakata, A. Umeno, M. Tsukada, and K. Hirakawa, Nano. Lett. **13**, (2013), 481
- [246] X. Zhang, S. Mizukami, T. Kubota, Q. Ma, M. Oogane, H. Naganuma, Y. Ando, and T. Miyazaki, Nat. Commun. **4**, (2013), 1392
- [247] T. Tran, T. Q. Le, J. G. Sanderink, W. G. van der Wiel, M. P. de Jong, Adv. Funct. Mater. **22**, (2012), 1180
- [248] M. Gobbi, F. Golmar, R. Llopis, F. Casanova, L. E. Hueso, Adv. Mater. **23**, (2011), 1609
- [249] D. M. Guldi, B. M. Illescas, C. M. Atienza, M. Wielopolskia, N. Martin, Chem. Soc. Rev. **38**, 2939, (2009), 1587



Résumé

Motivé par le domaine des nanotechnologies et grâce à l'importance des nanostructures, ce mémoire de thèse valorise l'étude des propriétés magnétiques à l'aide de la méthode de Monte Carlo. Ce travail débute par une introduction sur quelques modèles bidimensionnels, il décrit les principes et les notions de base de la simulation Monte Carlo ainsi les conditions aux bords de cette méthode. Ensuite, nous avons étudié les propriétés magnétiques par définir les phénomènes critiques, particulièrement les transitions de phase, le mouillage magnétique et l'ordre-désordre. Cette thèse se clôture par les résultats de nos différents travaux de recherche bien détaillés en étudiant les propriétés magnétiques, la température de compensation et les cycles d'hystérésis de nouveaux nanostructures. Finalement, nous achevons par une conclusion générale ainsi des perspectives.

Mots-clés : *Les simulations de Monte Carlo, Nanostructures, Mouillage, Ordre-désordre, Propriétés magnétiques, Température de compensation et de mouillage.*

Abstract

Motivated by the field of nanotechnologies and thanks to the importance of nanostructures, this dissertation presents the study of the magnetic properties of these compounds, using the Monte Carlo method. This work begins with an introduction to some two-dimensional models, then it describes the principles and basic concepts of Monte Carlo simulation. We use the Metropolis algorithm with cyclic boundary conditions. We have also studied the magnetic properties describing critical phenomena; particularly phase transitions, magnetic wetting and order-disorder. This thesis presents the results of various detailed research works by studying the magnetic properties, the compensation temperature and the hysteresis cycles of new nanostructures. Finally, we end with a general conclusion and perspectives.

Keywords: *Simulations of Monte Carlo, Nanostructures, Wetting, Order-disorder, Magnetic properties, Wetting compensation Temperature.*