

N° d'ordre : 3437

THESE DE DOCTORAT

Structure de Recherche : **Laboratoire de la Matière Condensée et des Sciences
Interdisciplinaires (LaMCScl)**

Présentée par :

Mohamed QAJJOUR

Discipline : **Physique**

Spécialité : **Physique des matériaux**

Titre :

**Etude des propriétés magnétiques de nanostructures
par la méthode de Monte Carlo**

Soutenue le 27 / 02 /2021 devant le jury :

Wahib OUSI BENOMAR	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V- Rabat	Président
Bousselham KABOUCHI	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V- Rabat	Directeur de thèse
Abdelaziz MHIRECH	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V- Rabat	Co-Directeur de thèse
Lahoucine BAHMAD	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V- Rabat	Rapporteur/Examineur
Mohamed DAOUD	PES, Faculté des Sciences, Université Ibn Tofaïl- Kénitra	Rapporteur/Examineur
Soumia ZITI	PH, Faculté des Sciences, Université Mohammed V- Rabat	Rapporteur/Examineur
El Mehdi SALMANI	PH, Faculté des Sciences, Université Mohammed V- Rabat	Examineur
Omar MOUNKACHI	PA, Faculté des Sciences, Université Mohammed V- Rabat	Invité

Année universitaire : 2020-2021

✉ Faculté des Sciences, 4 Avenue Ibn Battouta B.P. 1014 RP, Rabat-Maroc

☎ Tel : + 212 (0) 5 37 77 18 34/35/38 ; Fax : + 212 (0) 5 37 77 42 61 ; <http://www.fsr.ac.ma>

Citation

« La science, c'est ce que le père enseigne à son fils. La technologie, c'est ce que le fils enseigne à son père »

Michel Serres

Dédicaces

*Je dédie Le présent travail à mes parents, mon frère, mes sœurs et à
mon cousin Abdennaser*

*Je dédie également ce travail aux professeurs et mes collègues au sein
de l'équipe de recherche du Laboratoire de Matière Condensée
et Sciences Interdisciplinaires (LaMCS*I*)*

*Je dédie ce travail à toutes les personnes qui m'ont encouragé durant
les années de recherche pour accomplir ce travail*

Mohamed

Remerciements

Le présent travail de recherche a été effectué au Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCS*I*) du Département de Physique à la Faculté des Sciences de l'Université Mohammed V de Rabat, sous la Direction de Monsieur **Bousselham KABOUCHI**, et la Co-Direction de Monsieur **Abdelaziz MHIRECH**, Professeurs de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat.

Je remercie, en premier lieu, Dieu le plus Puissant qui m'a donné la force pour effectuer et accomplir le présent travail de recherche.

J'exprime mes profonds et sincères remerciements à Monsieur **Bousselham KABOUCHI**, (Directeur de thèse) pour ses qualités scientifiques et humaines, pour son orientation et ses précieux conseils, et surtout pour sa patience, sa disponibilité, et pour le temps qu'il me consacrait chaque fois que je le sollicitais. Je le remercie également pour ses encouragements et ses conseils.

J'exprime également mes vifs et sincères remerciements à Monsieur **Abdelaziz MHIRECH** (Co-Directeur de thèse) de m'avoir guidé, durant les années de thèse. Il a toujours eu le temps de répondre à mes questions de simulation et de programmation. Je le remercie infiniment pour les bonnes idées de recherche partagées.

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à Monsieur **Wahib OUSI BENOMAR**, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat, qui a bien voulu accepter de présider le jury de ma thèse.

Je remercie vivement Monsieur **Lahoucine BAHMAD**, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat, pour ses remarques et ses conseils très constructifs qui m'ont beaucoup aidé à mener à bien le présent travail et je le remercie infiniment d'avoir accepté de participer à mon jury de thèse en qualité de rapporteur.

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements à Monsieur **Mohamed DAOUD**, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences de l'Université Ibn Tofaïl de Kénitra pour avoir accepté d'évaluer mon travail de recherche en tant que rapporteur et examinateur.

Mes sincères remerciements vont à Madame **Soumia ZITI**, Professeur Habilité à la Faculté des Sciences de Rabat pour avoir accepté d'examiner et d'établir un rapport sur mon travail de thèse.

Je tiens à remercier également Monsieur **El Mehdi SALMANI**, Professeur Habilité à la Faculté des Sciences de Rabat pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail de recherche et pour avoir accepté d'examiner mon travail de thèse.

Je remercie Monsieur **Omar MOUNKACHI**, Professeur-Assistant à la Faculté des Sciences de Rabat pour le temps consacré à l'examen de ma thèse.

Je tiens à remercier du fond du cœur tous les membres de ma famille ; spécialement mon père, ma mère, mon frère et mes sœurs pour leurs soutiens et leurs encouragements sans faille, et qui sont toujours restés à mes côtés. Leur amour m'a permis de surmonter les moments difficiles pendant les années de recherche et d'études.

Je remercie aussi tous mes collègues du LaMCSsI et mes amis, pour les discussions fructueuses et pour les moments agréables passés ensemble.

Résumé

Récemment, l'exploration des propriétés de nouvelles nanostructures de matériaux dans le domaine des nanotechnologies connaît un essor important. Dans ce contexte, nous nous intéressons à l'étude des propriétés magnétiques de quelques nanostructures telles que celles du type graphène en nid d'abeille, borophène, nano-dicoronylène, ou structure de nanoréseau de spin lieb. Nous avons réussi grâce à la méthode de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis à étudier les propriétés magnétiques de ces structures. Nous avons appliqué le modèle de Blume-Capel pour explorer les transitions de phases magnétiques, la température critique, la température de compensation, le comportement des aimantations et des susceptibilités magnétiques, et des cycles d'hystérésis. En outre, nous avons discuté les effets des interactions de couplage d'échange et de la dilution sur les propriétés magnétiques des nanostructures étudiées. Les résultats obtenus montrent que le comportement des propriétés magnétiques considérées est fortement influencé par les paramètres physiques précités.

Mots-clés : Nanostructures, Monté Carlo simulation, Propriétés magnétiques, Température de compensation, Dilution, Cycles d'hystérésis.

Abstract

Recently, the exploration of the properties of new nanostructures of materials in the field of nanotechnologies has experienced significant growth. In this context, we are interested in the study of the magnetic properties of some nanostructures such as honeycomb graphene, borophene, nano-dicoronylene, or spin lieb nano-array structure. We have succeeded using the Monte Carlo method under the Metropolis algorithm to study the magnetic properties of these structures. We applied the Blume-Capel model to explore magnetic phase transitions, critical temperature, compensation temperature, behavior of magnetizations and magnetic susceptibilities, and hysteresis cycles. Furthermore, we discussed the effects of exchange coupling interactions and dilution on the magnetic properties of the studied nanostructures. The obtained results show that the behavior of the magnetic properties considered is strongly influenced by the physical parameters cited above.

Keywords : Nanostructures, Monte Carlo simulation, Magnetic properties, Compensation temperature, Dilution, Hysteresis cycles.

Table des matières

INTRODUCTION GENERALE	1
-----------------------------	---

CHAPITRE I: GENERALITES SUR LES PROPRIETES MAGNETIQUES DES MATERIAUX ET SUR LA METHODE DE SIMULATION	6
---	----------

I.1 PROPRIETES MAGNETIQUES DES MATERIAUX	8
<i>I.1.1 Introduction</i>	<i>8</i>
<i>I.1.2 Origines des moments magnétiques</i>	<i>8</i>
<i>I.1.3 Propriétés et quantités magnétiques</i>	<i>9</i>
<i>I.1.4 Différents types de magnétisme.....</i>	<i>11</i>
<i>I.1.5 Température de transition</i>	<i>16</i>
<i>I.1.6 Température de compensation</i>	<i>17</i>
<i>I.1.7 Etat fondamental</i>	<i>18</i>
<i>I.1.8 Hystérésis magnétique</i>	<i>18</i>
<i>I.1.9 Matériaux magnétiques durs et doux</i>	<i>20</i>
<i>I.1.10 Dilution</i>	<i>21</i>
I.2 MODELES THEORIQUES ET METHODE DE SIMULATION	22
<i>I.2.1 Introduction</i>	<i>22</i>
<i>I.2.2 Modèles théoriques</i>	<i>22</i>
<i>I.2.3 Conditions aux bords</i>	<i>27</i>
<i>I.2.4 Simulation par la méthode de Monte Carlo</i>	<i>30</i>
<i>I.2.5 Estimation des erreurs statistiques</i>	<i>41</i>
<i>I.2.6 Conditions d'application de la méthode de Monte Carlo</i>	<i>42</i>
<i>I.2.7 Méthode de Jackknife.....</i>	<i>42</i>
<i>I.2.8 Conclusion</i>	<i>43</i>

CHAPITRE II: EFFET DE LA DILUTION SUR LA TEMPERATURE DE COMPENSATION DANS UNE STRUCTURE DE GRAPHENE.....	44
---	-----------

II.1	INTRODUCTION.....	46
II.2	THEORIE ET MODELE.....	47
II.3	RESULTATS ET DISCUSSIONS	49
II.3.1	<i>Diagrammes de phases de l'état fondamental</i>	<i>49</i>
II.3.2	<i>Simulation par la méthode de Monte Carlo</i>	<i>51</i>
II.4	CONCLUSION	56

CHAPITRE III: PROPRIETES MAGNETIQUES D'UNE STRUCTURE BICOUCHES DE BOROPHENE A SPINS MIXTES.....58
--

III.1	INTRODUCTION.....	60
III.2	THEORIE ET MODELE	61
III.3	RESULTATS ET DISCUSSION	62
III.3.1	<i>Diagramme de phases de l'état fondamental.....</i>	<i>62</i>
III.3.2	<i>Résultats de la simulation par la méthode de Monte Carlo</i>	<i>66</i>
III.4	CONCLUSION.....	75

CHAPITRE IV: PROPRIETES MAGNETIQUES D'UNE STRUCTURE DE BOROPHENE BICOUCHES DILUEE.....76

IV.1	INTRODUCTION.....	78
IV.2	THEORIE ET MODELE	78
IV.3	RESULTATS ET DISCUSSION	80
IV.3.1	<i>Diagramme de phases de l'état fondamental.....</i>	<i>80</i>
IV.3.2	<i>Résultats de la simulation par la méthode de Monte Carlo</i>	<i>84</i>
IV.4	CONCLUSION.....	92

CHAPITRE V: TEMPERATURE DE COMPENSATION DE LA STRUCTURE NANO- DICORONYLENE A TROIS COUCHES AVEC SPINS MIXTES FERRIMAGNETIQUES (3 / 2 , 1) 94

V.1	INTRODUCTION.....	96
V.2	THEORIE ET MODELE	96
V.3	RESULTATS ET DISCUSSION	98

V.3.1	<i>Diagrammes de phases de l'état fondamental</i>	98
V.3.2	<i>Résultats de simulation Monte Carlo pour la structure de nano-dicoronylène</i>	102
V.4	CONCLUSION	109

CHAPITRE VI: EFFET DE LA DILUTION SUR LES PROPRIETES MAGNETIQUES DU NANORESEAU DE SPIN LIEB.....111
--

VI.1	INTRODUCTION	113
VI.2	THEORIE ET MODELE	114
VI.3	RESULTATS ET DISCUSSION	117
VI.3.1	<i>Résultats de la simulation par la méthode Monte Carlo</i>	117
VI.4	CONCLUSION	124
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES		125
ANNEXES		127
REFERENCES.....		139
Liste des publications		151

Liste des figures

Figure I-1: Illustration du moment magnétique associé à (a) un électron en orbite et (b) un électron en rotation.	9
Figure I-2: Diamagnétisme dans les matériaux :(a) Absence du champ magnétique externe. (b) Présence du champ magnétique externe.....	11
Figure I-3: Paramagnétisme dans les matériaux :(a) Absence du champ magnétique externe, les moments magnétiques atomiques dans le solide paramagnétique sont orientés de manière aléatoire. (b) Présence du champ magnétique externe, les moments ont tendance à s'aligner avec le champ.	12
Figure I-4 : Illustration des régions et de l'alignement mutuel des moments de spins pour un matériau ferromagnétique, pouvant exister même en l'absence de champ magnétique externe.	14
Figure I-5: Orientation des moments magnétiques dans le cas d'un matériau ferrimagnétique.	15
Figure I-6: Directions des moments magnétiques dans un matériau antiferromagnétique	16
Figure I-7: Représentation du comportement des cycles d'hystérésis.....	19
Figure I-8: Cycle d'hystérésis typique : (a) matériaux ferromagnétiques doux (b) matériaux ferromagnétiques durs.....	20
Figure I-9: Principe de la dilution dans un nanomatériau	21
Figure I-10: Modèle d'Ising pour un réseau bidimensionnel montrant l'interaction avec les proches voisins $S_{i,j+1}$, $S_{i,j-1}$, $S_{i+1,j}$ et $S_{i-1,j}$	24
Figure I-11: Application des conditions aux limites typiques pour un système bidimensionnel : (a) Conditions aux limites périodiques. (b) Conditions aux limites périodiques vis.	28
Figure I-12: Conditions aux limites de bords libres dans un système bidimensionnel	29
Figure II-1: Représentation du nanoréseau en nid d'abeille. (a): Dans le cas pur (b): avec dilution.	47
Figure II-2: Diagrammes de phases à l'état fondamental du réseau en nid d'abeille : (a) Dans le plan (δ, h) avec $R_{ss}=0.5$ et $R_{s\sigma}=-0.5$. (b) Dans le plan $(R_{ss}, R_{s\sigma})$ avec $h=0$ et $\delta =0$	50

Figure II-3: Aimantations en fonction de la température pour des valeurs fixes des paramètres $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $p = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$	51
Figure II-4: Variation de l'aimantation totale du réseau en nid d'abeille en fonction de la température et du paramètre de couplage R_{SS} pour : $R_{S\sigma} = -0.3$, $p = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$	52
Figure II-5: Variation de l'aimantation totale du réseau en nid d'abeille en fonction de la température et du paramètre de couplage $R_{S\sigma}$ pour $R_{SS} = 0.3$, $p = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$	53
Figure II-6: Effet de la dilution sur l'aimantation totale pour des valeurs fixes des paramètres : $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $h = 0$ et $\delta = 0$	54
Figure II-7: Aimantation totale en fonction du champ cristallin pour une probabilité d'occupation p et pour des valeurs sélectionnées des paramètres : $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $h = 0$ et $t = 0.5$	55
Figure II-8: Cycle d'hystérésis magnétique dans le réseau en nid d'abeilles en fonction de la probabilité de dilution pour : $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $\delta = 0$ et $t = 0.5$	56
Figure III-1: Représentation de la structure bicouches du borophène à spins mixtes.....	61
Figure III-2: Diagrammes de phases à l'état fondamental de la structure bicouches du borophène à spins mixtes (1, 3/2). (a): Dans le plan (δ, h) avec $R_1 = 1$ et $R_2 = -1$. (b): Dans le plan (R_1, R_2) avec $h = 0$ et $\delta = 0$. (c): Dans le plan (R_2, h) avec $h = 0$ et $R_1 = 1$. (d): Dans le plan (R_1, h) avec $R_2 = -1$ et $\delta = 0$. (e): Dans le plan (R_1, δ) avec $h = 0$ et $R_2 = -1$. (f): Dans le plan (R_2, δ) avec $h = 0$ et $R_1 = 1$	66
Figure III-3: (a) Aimantations (b) susceptibilités et (c) chaleur spécifique, en fonction de la température pour $R_2 = -1$, $R_1 = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$	68
Figure III-4: Effet du paramètre de couplage d'échange R_2 pour : $R_1 = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$. (a): Aimantation totale en fonction de la température. (b): Susceptibilité magnétique totale en fonction de la température.....	69
Figure III-5: Température critique en fonction du paramètre de couplage d'échange R_2 pour: $R_1 = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$	70
Figure III-6: Effet de l'interaction de couplage d'échange R_1 sur la variation thermique de : (a) l'aimantation totale et (b) la susceptibilité magnétique totale pour $R_2 = -1$, $h = 0$ et $\delta = 0$	71

Figure III-7: Variation de la température critique en fonction du paramètre de couplage R_1 pour : $R_2 = -1$, $h = 0$ et $\delta = 0$ 72

Figure III-8: Effet du champ magnétique externe sur les variations thermiques de : (a) Aimantation totale. (b) Susceptibilité magnétique totale, pour : $R_2 = -1$, $R_1 = 1$ et $\delta = 0$ 73

Figure III-9: Variation de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin pour : $t = 1$ et $h = 0$:..... 75

Figure IV-1: Représentation d'une structure de borophène à deux couches en présence des sites de dilution..... 79

Figure IV-2: Diagrammes de phases à l'état fondamental de la structure de borophène à deux couches avec spins mixtes $(3/2, 5/2)$, (a) dans le plan (d, h) pour $R_1=1$ et $R_2=-1$, (b) dans le plan (R_1, h) pour $R_2=-1$ et $d=0$, (c) dans le plan (R_2, h) avec $d=0$ et $R_1=1$, (d) dans le plan (R_1, R_2) pour $h=0$ et $d=0$, (e) dans le plan (R_1, d) pour $R_2=-1$ et $h=0$, (f) dans le plan (R_2, d) pour $R_1=1$ et $h=0$ 84

Figure IV-3: Comportement thermique des aimantations (a) et des susceptibilités (b) dans le cas pur, pour des valeurs fixes des paramètres $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$ et $d = 0$ 85

Figure IV-4: Effet de la probabilité de dilution P_σ en fonction de la température pour: $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$, $P_S = 1$ et $d = 0$ (a) sur les aimantations totales, (b) sur les susceptibilités totales. 87

Figure IV-5: Effet de probabilité de la dilution P_S en fonction de la température pour : $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$, $P_\sigma = 1$ et $d = 0$, (a) sur les l'aimantation totale, (b) sur la susceptibilité totale. 88

Figure IV-6: Comportement de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin pour $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$ et $t=1$, (a) effet de P_S , pour $P_\sigma=1$ (b) effet de P_σ , pour $P_S=1$ 90

Figure IV-7: Effet de la dilution sur les cycles d'hystérésis pour valeurs fixes des paramètres : $R_1 = 0,5$, $R_2 = -0,1$, $t = 0,5$ et $d = 0$, (a) la variation de la probabilité de dilution P_S dans le cas pur des spins σ ($P_\sigma = 1$), (b) la variation de la probabilité de la dilution P_σ 91

Figure V-1: Représentation d'une structure composée de trois couches de nano-dicoronylène avec spins mixtes $S = 0, \pm 1$ ou $\sigma = \pm 1/2, \pm 3/2$ 97

Figure V-2: Diagrammes de phases à l'état fondamental de la structure de type nano-dicoronylène à trois couches. (a) dans le plan (h, δ) pour $R_1 = -0.02$ et $R_2 = 0.2$. (b) dans le plan (h, R_2) pour $\delta = 0$ et $R_1 = -0.02$. (c) dans le plan (h, R_1) pour $\delta = 0$ et $R_2 = 0.2$. (d) dans le plan (R_1, R_2) pour $\delta = 0$ et $R_1 = 0.2$. (e) dans le plan (δ, R_1) pour $h = 0$ et $R_2 = 0.2$. (e) dans le plan (δ, R_2) pour $h = 0$ et $R_1 = -0.02$.	102
Figure V-3: (a) Aimantations (b) Susceptibilités, en fonction de la température pour des valeurs de paramètres fixes $R_2 = 0.2$, $R_1 = -0.02$, $h = 1$ et $\delta = 0.02$.	103
Figure V-4: Effets du paramètre de couplage R_2 sur l'aimantation et la susceptibilité totale en fonction de la température, pour $h = 1$, et $\delta = 0.02$. (a): Aimantation totale $R_1 = -0.02$. (b): Susceptibilité magnétique totale.	105
Figure V-5: Comportements de la température de compensation et de blocage pour $R_1 = -0.02$, $h = 1$ et $\delta = 0.02$.	106
Figure V-6: Aimantation totale pour $h = 0$ et $R_1 = -0.02$: (a) en fonction du champ cristallin en faisant varier le couplage d'échange ferrimagnétique R_2 pour $t = 0.2$ et (b) en fonction du paramètre de couplage d'échange en faisant varier la température pour $R_2 = -0.2$ et $\delta = 0$.	107
Figure V-7: Cycles d'hystérésis pour $R_1 = -0.02$ et $\delta = 0.02$. (a) en fonction de la température pour $R_2 = 0.2$. (b) en fonction du paramètre R_2 pour $t = 0.20$.	109
Figure VI-1: Représentation de la structure du nanoréseau de spin Lieb.	115
Figure VI-2: Variation de l'aimantation et de la susceptibilité dans la structure du nanoréseau de Lieb (a) Aimantations totale et partielles en fonction de la température dans le cas pur, pour $R_{sq} = 1$, $R_{\sigma q} = 0.5$. (b) Susceptibilité magnétique en fonction de la température, pour $R_{s\sigma} = 1$, $R_{sq} = 1$, $R_{\sigma q} = 0.5$.	118
Figure VI-3: Variation de l'aimantation et de la susceptibilité dans la structure du nanoréseau de Lieb. (a) Aimantation totale. (b) Susceptibilité totale en fonction de la température pour plusieurs valeurs de la probabilité de dilution p_s avec $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$.	120
Figure VI-4: Variation de l'aimantation et de la susceptibilité dans la structure du nanoréseau de Lieb (a) Aimantation totale avec dilution. (b) Susceptibilité totale en fonction de la température avec la dilution des spins S et q , pour deux valeurs de p_s et p_{sq} (0.7 et 0.9), $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$.	121

Figure VI-5: Aimantation totale en fonction du champ cristallin magnétique avec la dilution du spin S (a) avec la dilution des deux spins S et q (b), avec $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$ 122

Figure VI-6: Cycle d'hystérésis magnétique pour différentes valeurs de p_s à basse température $t = 0,1$ (a) et pour plusieurs valeurs de p_{sq} (b), avec $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$ 123

Figure VI-7: Champ magnétique coercitif en fonction de la probabilité p_s et p_{sq} , pour $R_{sq} = 1$, $R_{\sigma q} = 0.5$ et $t = 0.1$ 124

Introduction générale

De nos jours, les appareils électroniques les plus sophistiqués reposent sur des composants fabriqués à partir de nanomatériaux. En pratique, tous les aspects de notre vie quotidienne sont influencés à un degré ou à un autre par ces nano-systèmes. Ainsi, avec l'avancement de la recherche dans le domaine des sciences des matériaux, ces nanoparticules contribuent de plus en plus à la diminution du rapport volume/surface, ce qui engendre une modification des propriétés fondamentales (physiques, chimiques, magnétiques, électriques, thermiques, optiques, mécaniques, etc) par rapport à celles des particules massives [1,2]. En particulier, les nanomatériaux magnétiques qui connaissent un intérêt croissant grâce aux développements récents visant à intégrer des composés magnétiques en électronique et en spintronique [3–5]. Dans le domaine de stockage des données et de l'enregistrement d'information qui est assuré par des supports d'information électromagnétiques, le traitement de l'information est réalisé par la manipulation de la charge des porteurs dans les semi-conducteurs, tandis que le stockage des données est assuré par des matériaux magnétiques, principalement le stockage magnétique du disque dur [6–8]. En effet, l'étude des nanostructures constitue une discipline émergente en science des matériaux en raison de la conception d'appareils de très petite taille [9–13]. La spintronique et l'enregistrement haute densité nécessitent des processus de commutation magnétique rapide. Il est donc d'un grand intérêt de comprendre la dynamique de spin et la relaxation magnétique à l'échelle nanométrique. Outre les applications industrielles, les structures magnétiques à motifs sont très attrayantes en tant que modèles de système pour étudier les propriétés physiques fondamentales des petites particules magnétiques [6,14,15]. Depuis la mise en évidence de l'existence de l'électron par J. J. Thomson [16], les chercheurs de la physique de la matière condensée ont focalisé leur attention pour découvrir comment les électrons se propagent à travers la matière. P. Drude en 1905 est ainsi le premier à formuler, à travers la constante du temps de relaxation, une théorie capable d'expliquer une partie des résultats expérimentaux sans pour autant révéler l'origine de la diffusion des porteurs dans la matière. Plusieurs décennies de recherche ont permis ensuite d'élaborer de multiples théories. Celles-ci avaient pour but de révéler les mécanismes de diffusion électronique, et de rendre compte des comportements des résistances électriques des matériaux conducteurs formulés à travers la constante du temps de relaxation. Il s'agissait de

reformuler une théorie capable d'expliquer une partie des résultats expérimentaux sans pour autant révéler l'origine de la diffusion des porteurs dans la matière [14,17–19].

Par ailleurs, les technologies avancées reposent sur la recherche de la performance des matériaux et sur le développement de nouveaux matériaux dotés de nouvelles propriétés plus améliorées. Un traitement quantitatif de la corrélation entre la microstructure et les propriétés magnétiques des nanomatériaux nécessitent des techniques numériques et informatiques. Ces techniques, sont complémentaires aux techniques expérimentales, notamment dans la compréhension des propriétés magnétiques, qui définissent les performances des nanomatériaux. Les études expérimentales, telles que l'imagerie magnétique, ont de sérieuses difficultés à contrôler les propriétés magnétiques à l'échelle de quelques nanomètres dans l'espace ou à l'échelle de la nanoseconde dans le temps. Les propriétés magnétiques d'un nanomatériau, telles que la coercivité et la rémanence, et la stabilité thermique pourraient être prédites qualitativement par des simulations du comportement des propriétés des nanostructures. La variation rapide de nombreux paramètres extrinsèques et intrinsèques est accessible en utilisant des techniques numériques [20–22]. En général, de nombreux facteurs impactent le comportement des propriétés magnétiques d'un nano-système, comme la taille, les valeurs des spins considérés dans le système, l'anisotropie, les conditions aux limites, les impuretés ou la dilution

L'étude des systèmes dilués, constitue l'un des grands défis en physique statistique. Ceci est dû au fait que les matériaux purs sont rares dans la nature. Par conséquent, pour les caractériser et les identifier, les systèmes avec un désordre ont attiré beaucoup d'attention au cours des dernières décennies [23–26]. Pour étudier de tels systèmes, les chercheurs utilisent différentes techniques de calcul. L'une de ces techniques est la méthode de Monte Carlo qui est une classe puissante d'algorithmes qui n'est pas seulement utilisée en physique mais aussi dans d'autres domaines comme l'ingénierie, la chimie, la biologie, les sciences des matériaux, les finances et les statistiques [21,27,28].

Notre travail de recherche concerne la simulation des propriétés magnétiques de quelques nanostructures par la méthode de simulation de Monte Carlo. Il est organisé comme suit :

Nous commençons d'abord ce document de thèse par une introduction générale.

Ensuite, dans le premier chapitre, nous donnons une revue bibliographique sur les propriétés des matériaux et des détails de la méthode de simulation de Monte Carlo.

Dans le deuxième chapitre, à l'aide de la méthode de Monte Carlo sous l'algorithme Metropolis, nous étudions l'effet de la dilution sur les propriétés magnétiques dans un nanoréseau en nid d'abeilles (structure de graphène).

Le troisième chapitre est consacré à un système composé de deux couches étendues de structure borophène. Nous explorons les diagrammes de phases de l'état fondamental et l'effet des paramètres de couplage sur les propriétés magnétiques telles que l'aimantation, la susceptibilité, la chaleur spécifique et la température critique.

Dans le quatrième chapitre, nous exposons et discutons les résultats obtenus concernant l'effet de la dilution et des paramètres de couplage sur les propriétés magnétiques dans la structure de borophène bicouches.

Le cinquième chapitre traite les propriétés magnétiques d'une structure de type nano-dicoronylène à trois couches.

Dans le sixième chapitre, nous étudions un nanoréseau de spin lieb pour trois sous-réseaux et trois types de spins, en présence de sites de dilution

Enfin, nous terminerons ce document par une conclusion générale et des perspectives.

**CHAPITRE I: GENERALITES SUR LES PROPRIETES
MAGNETIQUES DES MATERIAUX ET SUR LA
METHODE DE SIMULATION**

I.1 PROPRIETES MAGNETIQUES DES MATERIAUX

I.1.1 Introduction

Depuis la découverte de la magnéto-résistance géante dans les multicouches ferromagnétiques [29,30], c'est-à-dire la modulation du transport d'électrons par les changements de configuration induits par le champ magnétique du profil d'aimantation, l'utilisation d'éléments ferromagnétiques dans les circuits et dispositifs électroniques s'est multipliée. Les mémoires magnétiques à accès aléatoire (MRAM) sont basées sur l'effet connexe de la magnéto-résistance à effet tunnel (TMR) entre deux ferromagnets séparés par une barrière tunnel [31]. Les MRAM ont l'avantage d'être non volatiles, ce qui signifie qu'une tension appliquée n'est pas nécessaire pour maintenir un état de mémoire donné, et sont donc de sérieux concurrents pour les mémoires flash dans les processeurs, les applications logiques reprogrammables, etc. Ces applications et d'autres sont examinées par Parkin[32–34]. Avec la diminution de la taille des éléments magnétiques dans les supports de stockage magnétiques, les têtes de lecture magnétiques et les éléments MRAM, le temps et l'énergie nécessaires pour lire et écrire un domaine magnétique sont des paramètres cruciaux étudiés de manière intensive par la communauté scientifique et dans l'industrie des nanomatériaux [35].

La simulation des propriétés magnétiques des matériaux peut être réalisée à l'aide de la simulation de Monte Carlo. En effet, cette méthode est l'une des techniques de simulations informatiques largement appliquée pour étudier les propriétés des systèmes physiques [36]. Le principal avantage d'une telle technique est qu'elle conduit à modifier à volonté les paramètres physiques. De nos jours, la méthode de Monte Carlo est utilisée dans une grande variété de domaines.

I.1.2 Origines des moments magnétiques

Les propriétés magnétiques macroscopiques des matériaux sont une conséquence des moments magnétiques associés aux électrons. Chaque électron dans un atome a des moments magnétiques qui proviennent de deux sources. L'une est liée à son mouvement orbital autour du noyau ; parce qu'il s'agit d'une charge en mouvement, un électron peut être considéré comme une petite boucle de courant, générant un très petit champ magnétique et ayant un moment magnétique le long de son axe de rotation, comme illustré schématiquement sur la figure I-1(a). Chaque électron peut également être considéré comme tournant autour d'un axe ; l'autre moment magnétique provient de ce spin électronique, qui est dirigé le long de l'axe de spin comme le

montre la figure I-1(b). Les moments magnétiques de rotation peuvent être uniquement dans une direction ascendante « up » ou dans une direction antiparallèle descendante « down ». Ainsi, chaque électron d'un atome peut être considéré comme un petit aimant ayant des moments magnétiques orbitaux et de spin permanent. Le moment magnétique le plus fondamental est le magnéton de Bohr qui est de magnitude $\mu_B = 9.27 \times 10^{-24}$ A.m². De plus, la contribution du moment magnétique orbital est égale à $m_l \mu_B$, m_l étant le nombre quantique de l'électron.

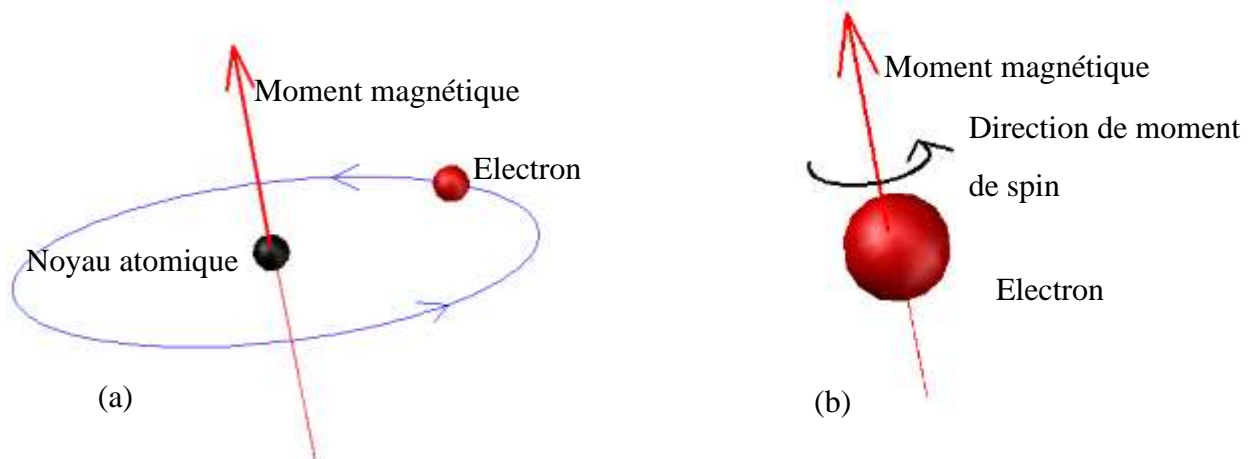


Figure I-1: Illustration du moment magnétique associé à (a) un électron en orbite et (b) un électron en rotation.

I.1.3 Propriétés et quantités magnétiques

Avant de discuter les différents types de magnétisme dans les matériaux, il est utile de donner les différentes propriétés et quantités magnétiques, car les différents phénomènes magnétiques sont généralement expliqués en termes de ces propriétés et quantités.

I.1.3.1 Densité de flux magnétique

Si un courant de 1 Ampère fixe traverse une bobine de fil dans le vide, le courant électrique provoquera la production d'un champ magnétique. La meilleure façon de voir la force d'un champ magnétique, c'est à travers la densité de flux magnétique parfois appelée « induction magnétique ». La densité de flux magnétique, \mathbf{B} , est un vecteur proportionnel à la force du champ magnétique, et pointant dans la même direction que le champ magnétique.

I.1.3.2 Perméabilité magnétique

La perméabilité relative d'un matériau est définie par la formule suivante :

$$\mu_r = \frac{B}{H} \quad (\text{I.1})$$

B : est la densité de flux magnétique

H : est un vecteur, appelé l'intensité magnétique.

I.1.3.3 Aimantation

L'aimantation **M** d'un matériau, est donnée par l'expression suivante :

$$B = \mu_0 H + \mu_0 M \quad (\text{I.2})$$

μ_0 : est la perméabilité magnétique du vide et elle a la valeur : $4\pi \times 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$.

M : est le rapport entre le moment magnétique total de l'ensemble du matériau et le volume total du matériau. L'aimantation **M** relie les effets atomiques microscopiques aux effets magnétiques mesurables macroscopiques par la formule :

$$M = n \times m \quad (\text{I.3})$$

Où **n** est le nombre de moments atomiques par unité de volume et **m** est le moment partiel.

I.1.3.4 Susceptibilité magnétique

Comme la perméabilité relative, la susceptibilité magnétique, donne une autre façon assez simple de décrire les propriétés magnétiques macroscopiques d'un matériau, car c'est également une mesure de la façon dont un matériau magnétique répond à un champ magnétique appliqué.

La susceptibilité magnétique est liée à l'aimantation comme suit :

$$\chi = \frac{M}{H} \quad (\text{I.4})$$

Elle est liée aussi à la perméabilité relative par :

$$\chi = \mu_r - 1 \quad (\text{I.5})$$

La susceptibilité χ n'a pas d'unité. Elle peut être positive ou négative (voir le tableau I-1), et peut varier en ferromagnétique qu'on va voir par la suite de ce chapitre.

I.1.4 Différents types de magnétisme

I.1.4.1 Diamagnétisme

Le diamagnétisme est une forme très faible de magnétisme qui n'est pas permanente et persiste uniquement pendant l'application d'un champ externe [37] comme indiquée sur la figure I-2. Il est induit par une modification du mouvement orbital des électrons due à un champ magnétique appliqué. L'amplitude du moment magnétique induit est extrêmement faible et dans une direction opposée à celle du champ appliqué. Ainsi, la susceptibilité magnétique est négative et inférieure à l'unité [38–40]. Cependant, il existe des matériaux qui ne montrent qu'une réponse diamagnétique. En présence d'un champ magnétique, les électrons atomiques de ces matériaux modifient leur vitesse et leurs orbites autour du noyau de telle manière que les atomes produisent un champ magnétique qui s'oppose au champ externe. Dans les métaux, les électrons de conduction contribuent également au diamagnétisme global en modifiant leurs mouvements pour produire un champ magnétique qui s'oppose au champ externe. Le tableau I-1 donne quelques valeurs de la susceptibilité magnétique. Le diamagnétisme est la forme de magnétisme la plus faible et il existe à toutes les températures dans tous les matériaux. Parce que c'est un effet si faible, il est souvent masqué par d'autres types de magnétisme, il n'est donc observé que dans des substances qui ne présentent pas d'effets magnétiques forts, comme les créatures et les plantes vivantes, l'eau et les plastiques

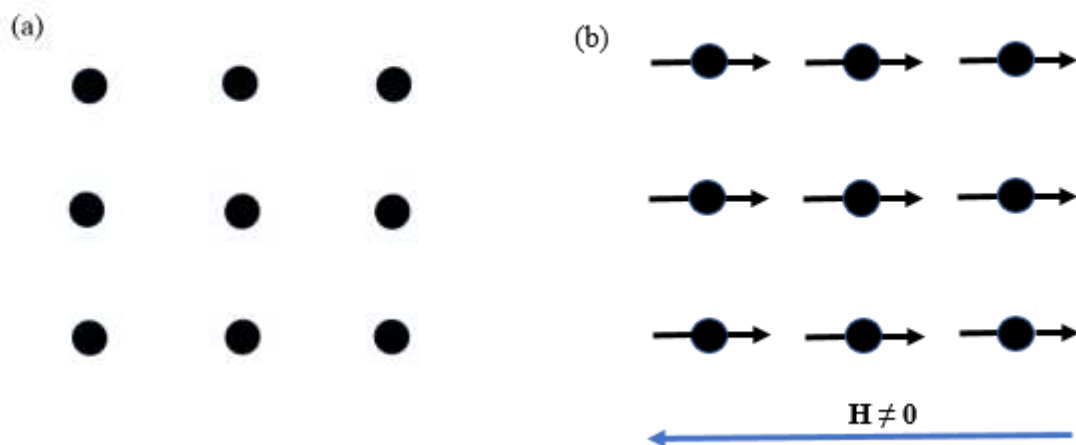


Figure I-2: Diamagnétisme dans les matériaux :(a) Absence du champ magnétique externe. (b) Présence du champ magnétique externe.

I.1.4.2 Paramagnétisme

Comme le diamagnétisme, le paramagnétisme n'est apparent que lorsqu'un champ magnétique est appliqué et est provoqué par le mouvement des électrons comme illustré dans la figure I-3. L'analogie s'arrête là, car, les matériaux paramagnétiques ont une faible attraction pour les champs magnétiques. Lorsqu'une substance paramagnétique est placée dans un champ magnétique, il y a un alignement partiel des moments magnétiques atomiques dans la direction du champ, résultant en une aimantation positive nette et une susceptibilité positive. Chaque atome de cette substance produit son propre champ magnétique qui expulse le champ externe. Cela fait que les substances paramagnétiques et les champs magnétiques se repoussent comme s'il s'agissait de deux pôles nord magnétiques.

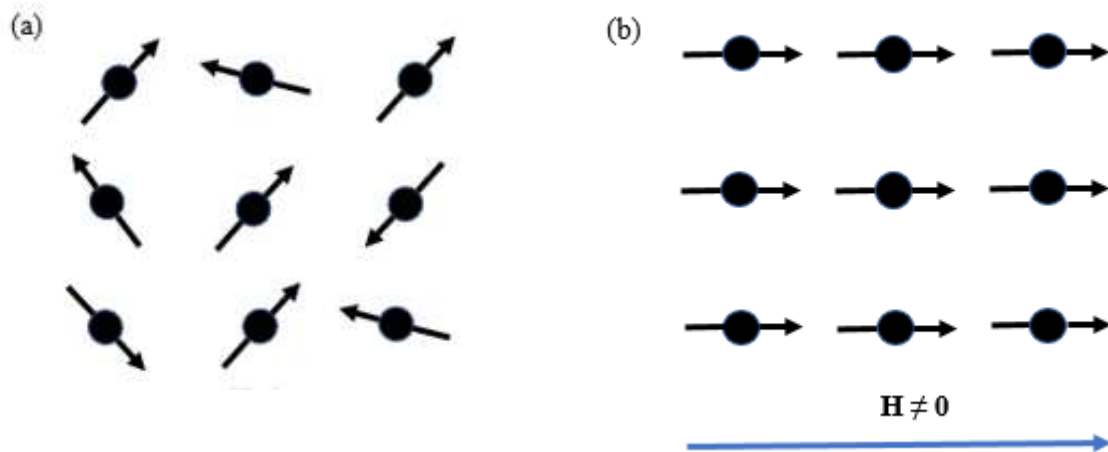


Figure I-3: Paramagnétisme dans les matériaux :(a) Absence du champ magnétique externe, les moments magnétiques atomiques dans le solide paramagnétique sont orientés de manière aléatoire. (b) Présence du champ magnétique externe, les moments ont tendance à s'aligner avec le champ.

Diamagnétisme		Paramagnétisme	
Matériaux	Susceptibilité (SI)	Matériaux	Susceptibilité (SI)
Oxide d'Aluminium	-1.81×10^{-5}	Aluminium	2.07×10^{-5}
Or	-3.44×10^{-5}	Chrome	3.13×10^{-4}
Mercure	-2.85×10^{-5}	Sulfate de manganèse	3.70×10^{-3}
Silicium	-0.41×10^{-5}	Sodium	8.48×10^{-6}
Chlorure de sodium	-1.41×10^{-5}	Titane	1.81×10^{-4}
Zinc	-1.56×10^{-5}	Zirconium	1.09×10^{-4}

Tableau I-1: Susceptibilité magnétique à température ambiante pour quelques matériaux diamagnétique et paramagnétique [41].

Le paramagnétisme dépend de la température, car la chaleur a tendance à favoriser le désalignement des moments magnétiques. En fait, le physicien français Pierre Curie (1859-1906), a montré que la susceptibilité magnétique des matériaux paramagnétiques varie inversement avec la température.

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (I.6)$$

Où C : est la constante de Curie et T est la température absolue. Il a été démontré plus tard que la loi de Curie n'est qu'un cas particulier d'une loi plus général suivante :

$$\chi = \frac{C}{T - \theta} \quad (I.7)$$

Où θ est la constante de Weiss qui peut avoir une valeur positive ou négative.

I.1.4.3 Ferromagnétisme

Les matériaux métalliques dites ferromagnétiques lorsqu'ils possèdent un moment magnétique permanent en l'absence de champ extérieur et manifestent des aimantations très importantes et permanentes. Les moments magnétiques permanents dans les matériaux ferromagnétiques résultent de moments magnétiques atomiques dus à des spins d'électrons non annulés en raison de la structure électronique. Il existe également une contribution au moment magnétique orbital qui est faible par rapport au moment de spin. De plus, dans un matériau ferromagnétique, les interactions de couplage (les types des interactions de couplage sont donnés dans l'annexe 1) provoquent l'alignement des moments magnétiques de spin net des atomes adjacents, même en l'absence de champ externe. D'autre part, à une température inférieure à la température critique T_c , tout matériau ferromagnétique est composé de régions de petit volume dans lesquelles il existe un alignement mutuel dans la même direction de tous les moments magnétiques [42], comme il est schématisé sur la figure I-4.a et I-4.b. Dans le cas des matériaux ferromagnétiques, la susceptibilité magnétique est toujours positive, comme pour le paramagnétisme, mais elle dépend du champ magnétique et de la température. La valeur de la susceptibilité magnétique dans le cas des matériaux ferromagnétique est relativement grande [43]. Les éléments Fe, Ni et Co et leurs alliages sont des matériaux ferromagnétiques typiques.

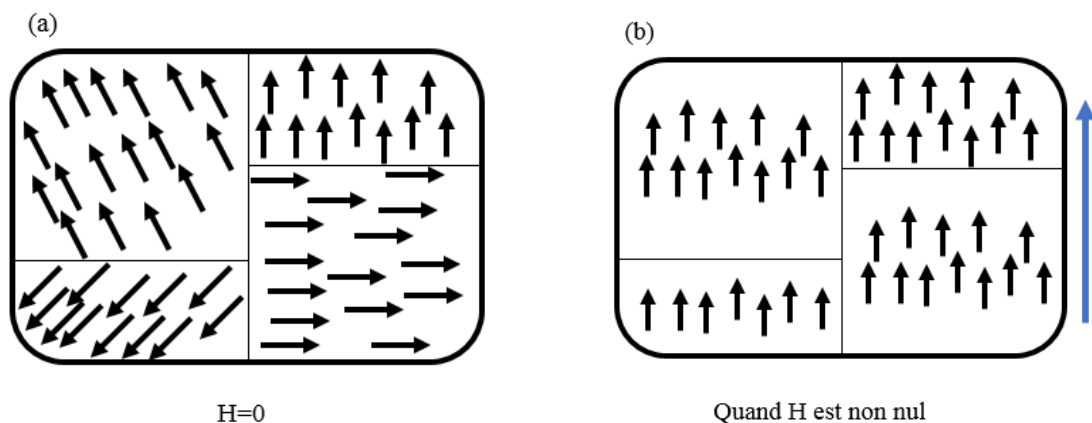


Figure I-4 : Illustration des régions et de l'alignement mutuel des moments de spins pour un matériau ferromagnétique, pouvant exister même en l'absence de champ magnétique externe.

I.1.4.4 Ferrimagnétisme

Les caractéristiques magnétiques macroscopiques des ferromagnétiques et des ferrimagnétiques sont similaires ; la distinction réside dans la source des moments magnétiques nets. Les moments magnétiques des atomes voisins sont antiparallèles, mais également de force inégale comme il est indiqué sur la figure I-5. La classe la plus importante de matériaux ferrimagnétiques est les ferrites, qui sont des doubles oxydes de fer. Certaines céramiques présentent également une aimantation permanente, appelée ferrimagnétisme. Comme les ferromagnétiques, ils sont constitués de domaines magnétiquement saturés et ils présentent les phénomènes de saturation magnétique et d'hystérésis.

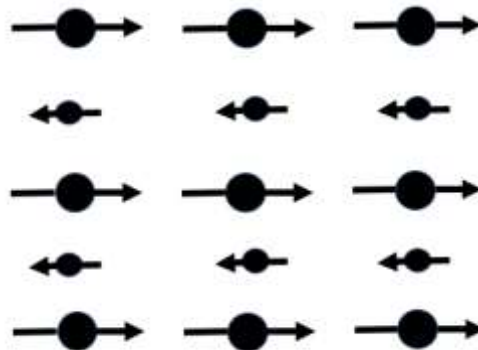


Figure I-5: Orientation des moments magnétiques dans le cas d'un matériau ferrimagnétique.

I.1.4.5 Antiferromagnétique

De la même manière que dans un matériau ferromagnétique (les moments magnétiques ne sont pas alignés qu'en dessous de la température de Curie), dans un matériau antiferromagnétique les moments ne sont que dans un arrangement ordonné en dessous d'une température critique connue sous le nom de température de Néel. Les matériaux antiferromagnétiques deviennent également paramagnétiques au-dessus de la température critique parce que les moments magnétiques ne s'alignent plus. L'oxyde de manganèse (MnO) est un matériau qui présente ce comportement [44]. Lorsqu'ils sont en dessous de T_c , les matériaux antiferromagnétiques (comme les matériaux ferromagnétiques) ont les moments magnétiques pointant dans une direction particulière et le moment sur un atome donné pointera dans une direction opposée au moment magnétique de l'atome voisin, comme il est schématisé sur la figure I-6.

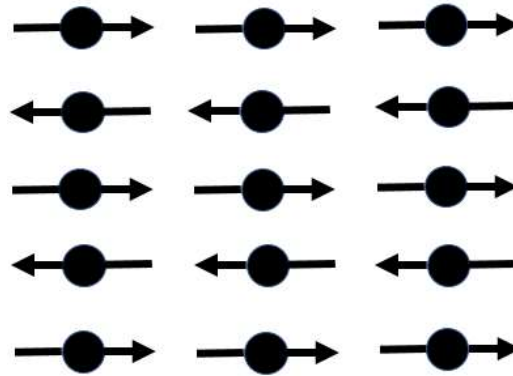


Figure I-6: Directions des moments magnétiques dans un matériau antiferromagnétique

I.1.5 Température de transition

I.1.5.1 Température de Curie

La température de Curie T_c (ou aussi le point de Curie) est la température de transition au-delà de laquelle un matériau ferromagnétique perd son aimantation permanente pour devenir un matériau paramagnétique. Ce phénomène a été découvert par le physicien français Pierre Curie en 1895. La température de Curie est également une propriété intrinsèque, c'est un paramètre de diagnostic qui peut être utilisé pour l'identification des minéraux. Cependant, il n'est pas infallible car différents minéraux magnétiques, en principe, peuvent avoir la même température de Curie. Les températures de Curie des trois métaux ferromagnétiques, le fer, le cobalt et le nickel, sont respectivement de 1044 K, 1388 K et 628 K. Aucun matériau n'est connu pour une température de Curie plus élevée que le cobalt. La magnétite a une température de Curie de 856 K. Au-dessous du point de Curie, les interactions d'échanges d'ordre ferromagnétiques tendent à aligner parallèlement les moments magnétiques dans le matériau. En effet, avec l'augmentation de la température l'agitation thermique augmente et les spins fluctuent rapidement. La transition au point de Curie se produit quand l'énergie d'agitation thermique domine l'énergie d'interaction magnétique [45].

I.1.5.2 Température de Néel

La température de Néel (ou le point de Néel) est la température de transition au-delà de laquelle un matériau antiferromagnétique perd son aimantation permanente et devient paramagnétique. Ce point de transition a été découvert par le physicien Louis Néel qui a reçu le prix de Nobel de physique. A la proximité de point de Néel, l'énergie thermique devient assez importante pour rompre l'ordre magnétique microscope au sein du matériau antiferromagnétique. Le point

de Néel en analogie avec le point de Curie est un phénomène intrinsèque réversible où le matériau peut récupérer ses propriétés antiferromagnétiques lorsque sa température est inférieure à la température de Néel.

I.1.5.3 Température de blocage

La température de blocage est un point de transition lié à l'état super-paramagnétique. En dessous d'un certain volume et vue l'agitation thermique des particules, l'aimantation partielle d'un nanomatériau fluctue entre deux directions. L'état super-paramagnétique est caractérisé par le temps de relaxation τ qui est le temps nécessaire pour que l'aimantation bascule d'une direction à l'autre. La température de blocage est la température en dessous de laquelle la direction de l'aimantation est bloquée. Le temps de relaxation τ et la température de blocage sont deux grandeurs qui dépendent du volume de la particule. La température de blocage peut être obtenue à partir du pic de la courbe de la susceptibilité magnétique totale obtenue par une simulation par la méthode de Monte Carlo [46–48].

I.1.6 Température de compensation

La température de compensation T_{comp} est un paramètre utilisé pour ajuster les performances d'un système afin de compenser les effets causés par les changements de température et des autres paramètres physiques. Il s'agit d'un paramètre important dans la fabrication de composants de haute précision. Le point de compensation donne donc une valorisation aux matériaux magnétiques pour des applications technologiques, surtout dans le domaine d'enregistrement thermomagnétique [49] et magnéto-optique [50]. La température de compensation T_{comp} peut être présentée dans les matériaux ferrimagnétiques, sous certaines conditions. L'apparition de T_{comp} est liée à la nature des interactions de couplage entre deux sous réseaux dans un matériau ferrimagnétique. Le point de compensation est la température à laquelle l'aimantation des deux sous-réseaux a la même valeur mais des signes opposés. Dans ce cas, l'aimantation totale est nulle et le système est dans sa phase ferrimagnétique. Pour obtenir la température de compensation T_{comp} , nous considérons les deux sous réseaux (S et σ) et nous recherchons le point d'intersection des valeurs absolues des aimantations des deux sous-réseaux comme suit :

$$|M_S(t_{comp})| = |M_\sigma(t_{comp})| \quad (I.8)$$

avec des signes opposés :

$$\text{signe}|M_S(t_{comp})| = - \text{sign}|M_\sigma(t_{comp})| \quad (\text{I.9})$$

De plus, la valeur de la température de compensation est toujours inférieure à la valeur de la température de transition. Cette dernière est la valeur de température à laquelle les aimantations partielles et totales tendent à devenir nulles ; le système est dans sa phase paramagnétique. A partir du point de compensation, la coercivité du matériau dépend fortement de la température [51–53].

I.1.7 Etat fondamental

L'étude de l'état fondamental est d'une importance capitale pour comprendre le comportement critique des systèmes. Les diagrammes de phase d'un système sont calculés en comparant les valeurs de l'énergie pour différentes configurations de spin. Les configurations stables de l'état fondamental sont celles avec l'énergie la plus faible [54]. Pour l'analyse des modèles de spins mixtes, il est important de connaître le comportement du système à $T = 0$. Les diagrammes de phase de l'état fondamental peuvent avoir plusieurs régions avec différentes valeurs d'énergie, des configurations de spin et des points multiphasiques où peuvent coexister plus de deux phases [55]. Autour des points polyphasiques peuvent émerger de nombreux phénomènes critiques, tels que des transitions de phase du premier ordre et des points tri-critiques [56]. De plus, le calcul exact des énergies de l'état fondamental peut vérifier la fiabilité des résultats de la simulation numérique, comme la simulation par la méthode Monte Carlo [57].

I.1.8 Hystérésis magnétique

Tout matériau ferromagnétique ou ferrimagnétique qui est, à une température inférieure à la température de transition T_c , est composé de régions de petit volume dans lesquelles il y a un alignement mutuel dans la même direction de tous les moments magnétiques, comme illustré précédemment dans ce chapitre. Une telle région est appelée un domaine, et chaque domaine atteint sa saturation. Les domaines peuvent être observés à l'aide de diverses techniques tel que la méthode Bitter Powder [58]. Les domaines adjacents sont séparés par des limites de domaine ou des parois, à travers lesquels la direction de l'aimantation change progressivement. Normalement, les domaines sont de taille microscopique. Ainsi, dans un morceau de matériau macroscopique, il y aura un grand nombre de domaines, et tous peuvent avoir des orientations

différentes de l'aimantation. De ce fait, la magnitude du champ pour l'ensemble du solide est la somme vectorielle de l'aimantation de tous les domaines, chaque contribution de domaine étant pondérée par sa fraction volumique. Lorsqu'un champ magnétique externe est appliqué, les domaines ayant des vecteurs de l'aimantation orientés dans la direction du champ croissent. À saturation totale, le solide entier est un seul domaine et l'aimantation est alignée avec la direction du champ. La figure I-7 montre une boucle d'hystérésis typique prévue pour mesurer l'aimantation en fonction du champ magnétique appliqué pour un échantillon ferromagnétique/ferrimagnétique. À partir d'une courbe d'hystérésis complète (voir figure I-7) pour un matériau ferromagnétique et ferrimagnétique, les éléments suivants peuvent être déterminés [59]:

- ✓ **La rémanence (r)** : valeur de l'aimantation lorsque le champ externe est nul.
- ✓ **La coercivité (h_c)** : valeur du champ lorsque l'aimantation est nulle.
- ✓ **L'aimantation de saturation (M_{sat})** : c'est l'aimantation maximale obtenue lorsque l'augmentation du champ magnétique externe ne peut pas augmenter l'aimantation du matériau.

Si l'échantillon est magnétisé à l'aimantation de saturation M_s par un champ appliqué, alors lorsque le champ appliqué est réduit à zéro, l'aimantation se réduit à l'aimantation rémanente. Un champ magnétique égal au champ coercitif h_c est nécessaire pour commuter l'aimantation dans la direction opposée [41].

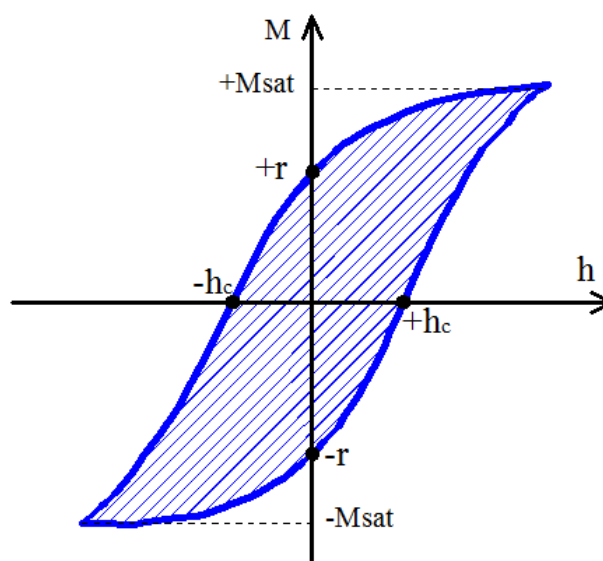


Figure I-7: Représentation du comportement des cycles d'hystérésis

I.1.9 Matériaux magnétiques durs et doux

Selon la largeur de la boucle d'hystérésis et la facilité avec laquelle ils peuvent être magnétisés, les matériaux ferromagnétique et ferrimagnétique peuvent être classés en deux groupes : les matériaux magnétiques durs et les matériaux magnétiques doux [41].

Pour les matériaux magnétiques durs sur la figure I-8 (b), le mouvement de la paroi du domaine est beaucoup plus difficile, ce qui entraîne des boucles d'hystérésis plus grandes. L'enregistrement magnétique est une application importante des matériaux magnétiques durs. La densité surfacique des bits pouvant être enregistrés à l'aide de matériaux magnétiques a considérablement augmenté au cours des dernières années, reflétant une amélioration constante de la compréhension et de la fabrication des matériaux magnétiques. Par contre, si la zone est petite, le matériau est dit magnétiquement doux voir la figure I-8 (a). Par conséquent, ils ont de petites boucles d'hystérésis et de faibles pertes d'énergie. Par contre, Les aimants doux sont utilisés dans les bobines de transformateur, les générateurs et les moteurs. Dans ces applications, l'aimantation doit être inversée plusieurs fois par seconde et il est important de minimiser l'énergie dissipée à chaque cycle [60].

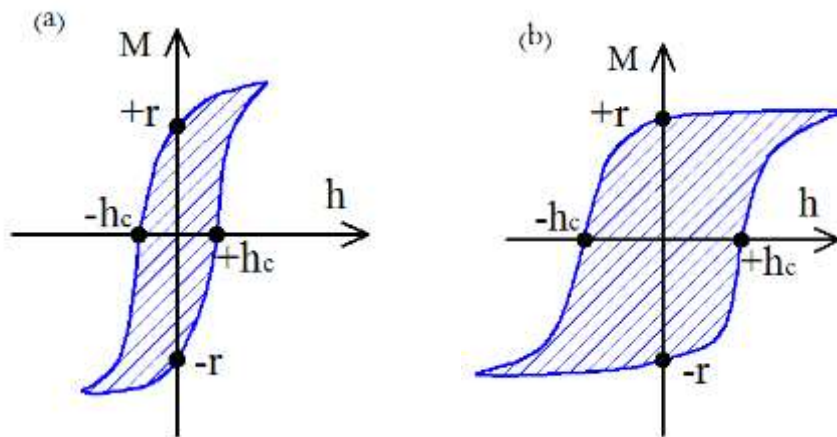


Figure I-8: Cycle d'hystérésis typique : (a) matériaux ferromagnétiques doux (b) matériaux ferromagnétiques durs

I.1.10 Dilution

La dilution est le meilleur moyen de simuler la présence des impuretés en petites quantités dans un matériau. De plus, le rôle de la dilution (ou du désordre, en général) peut être importante, car les systèmes purs ne sont pas omniprésents dans la nature et la croissance contrôlée de matériaux non homogènes peuvent permettre la sélection du comportement physique souhaité [61]. Lors de l'étude des propriétés magnétiques des nanomatériaux, la dilution ou le désordre consiste donc à introduire des atomes non magnétiques qui vont se substituer à certains atomes initiaux, comme il est schématisé dans la figure I-9. La concentration de ces atomes non magnétiques doit être négligeable devant celle des atomes du matériau initial.

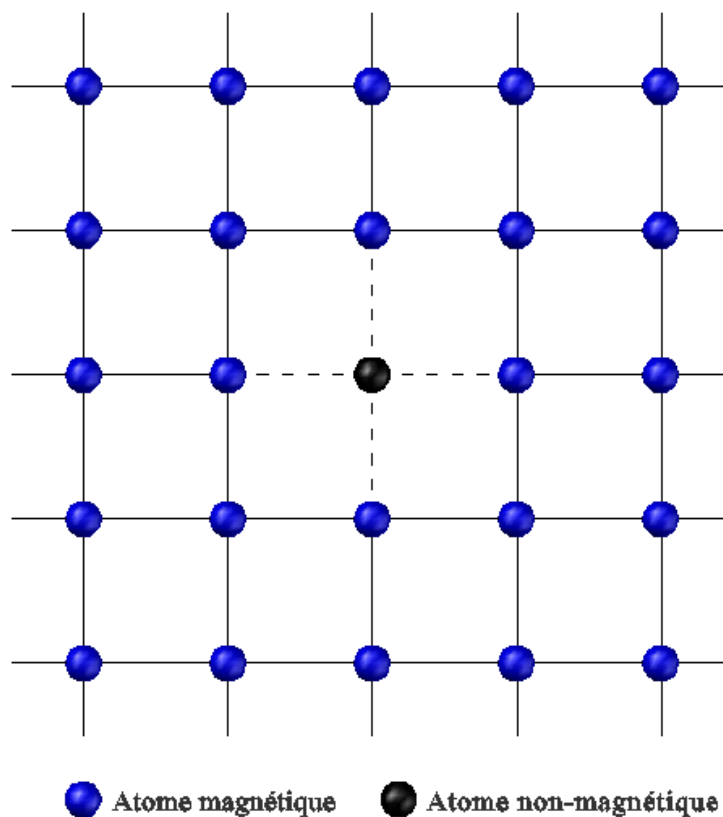


Figure I-9: Principe de la dilution dans un nanomatériau

I.2 MODELES THEORIQUES ET METHODE DE SIMULATION

I.2.1 Introduction

La simulation de Monte Carlo est l'une des techniques de simulation informatique qui a été largement appliquée pour découvrir les propriétés des systèmes physiques [36]. Le principal avantage d'une telle technique est qu'elle nous conduit à modifier à volonté les paramètres physiques. La méthode de Monte Carlo est un ensemble de techniques qui résolvent un problème en générant des nombres aléatoires appropriés et en observant cette fraction des nombres obéissant à certaines propriétés. L'idée de base de la simulation Monte Carlo est de simuler la fluctuation thermique aléatoire du système d'un état à l'autre au cours d'une expérience. La technique est utile pour obtenir des solutions numériques à des problèmes trop compliqués à résoudre analytiquement. Il a été nommé la méthode Monte Carlo par S. Ulam [62] ce nom fait référence au casino de Monte Carlo qui est connu par des jeux basés sur la génération de nombres aléatoires. La méthode Monte Carlo est basée sur l'idée d'un échantillonnage aléatoire répété de l'espace de recherche et l'application de statistiques pour calculer la valeur recherchée. La méthode a tendance à être utilisée lorsqu'il est impossible de calculer un résultat exact avec un algorithme déterministe. Les algorithmes de Monte Carlo sont généralement définis comme une classe d'algorithmes qui utilisent un échantillonnage aléatoire pour résoudre un problème. Bien que le premier algorithme de Monte Carlo remonte au milieu du XIXe siècle, ils n'ont acquis leur nom moderne et leur large acceptation qu'avec l'avènement des ordinateurs électriques [63]. De nos jours, la méthode de Monte Carlo est utilisée dans une grande variété de domaines, notamment la chimie, la biologie, les sciences des matériaux, les finances, les statistiques et, bien sûr, la physique. En général, la simulation de Monte Carlo est une méthode stochastique pour calculer n'importe quelle quantité d'un système qui a plusieurs degrés de liberté.

I.2.2 Modèles théoriques

I.2.2.1 Modèles de spin

L'interaction forte entre un grand nombre de particules est la propriété essentielle de la matière condensée. Il n'est pas possible d'ignorer ces interactions ou de les considérer comme une petite perturbation, comme ce serait le cas dans les milieux dilués. Pour définir des quantités macroscopiques, telles que l'aimantation, la susceptibilité magnétique, l'énergie libre, l'entropie ou la chaleur spécifique, une approche alternative de la physique statistique ; pour comprendre

le comportement magnétique des solides consiste à considérer des modèles microscopiques particuliers de l'interaction magnétique pour la simulation et l'exploration des propriétés des matériaux.

I.2.2.2 Modèle d'Ising

La physique statistique traite des systèmes avec de nombreux degrés de liberté. Un problème typique posé par la physique statistique est de calculer la valeur moyenne des observables macroscopiques d'un système dont l'hamiltonien est supposé être connu. Le modèle d'Ising est le modèle le plus simple ; c'est un modèle dans lequel les spins ne sont autorisés qu'à pointer vers le haut ou vers le bas, c'est-à-dire que nous ne considérons que la composante z du spin. L'hamiltonien de ce modèle est donné par :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (\text{I.10})$$

Où le spin S_i , au site i du réseau, peut pointer vers le haut « up » ou vers le bas « down », $\langle i,j \rangle$ désigne la somme sur les sites les plus proches voisins comme il est schématisé sur la figure I-10. J est l'interaction d'échange entre les voisins les plus proches.

Si $J > 0$, l'interaction entre les spins S_i et S_j est de type ferromagnétique.

Si $J < 0$, l'interactions entre les spins S_i et S_j est de type antiferromagnétique.

Si $J = 0$, l'interactions entre les spins S_i et S_j est absente.

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

Si $H > 0$, tous les spins sont orientés en haut « up ».

Si $H < 0$, tous les spins sont orientés en bas « down ».

Si $H = 0$, Absence du champ magnétique externe.

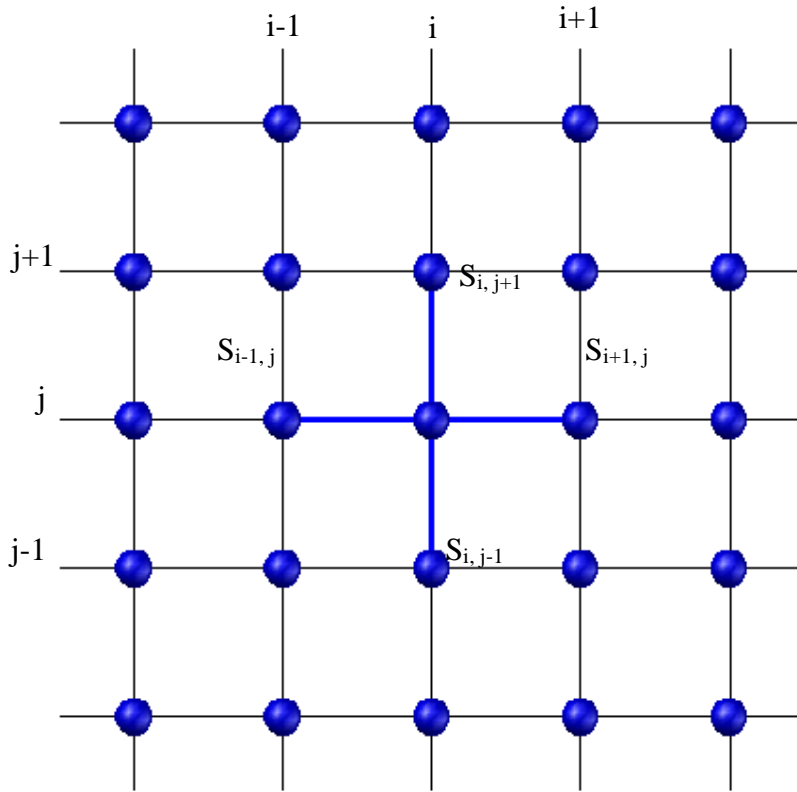


Figure I-10: Modèle d'Ising pour un réseau bidimensionnel montrant l'interaction avec les proches voisins $S_{i,j+1}$, $S_{i,j-1}$, $S_{i+1,j}$ et $S_{i-1,j}$.

I.2.2.3 Modèle Blume-Emery-Griffiths

Le modèle de Blume-Emery-Griffiths ou le modèle BEG est un autre modèle de spin qui gouverne les interactions entre les particules. Depuis son introduction en 1971, ce modèle est utilisé pour donner une description du comportement des phénomènes critiques et multicritiques [64]. Au début, le modèle BEG a été présenté pour décrire la séparation de phase et la superfluidité dans les mélanges ^3He - ^4He [65], puis il a été utilisé par la suite pour décrire les systèmes caractérisés par trois états de spin. Ce modèle présente à la fois la transition de phase du premier et du second ordre. Le modèle BEG est décrit par l'hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (\text{I.11})$$

Les paramètres physiques J et K sont respectivement l'interaction bilinéaire et l'interaction quadratique. Le terme $\langle i, j \rangle$ indique que la sommation ne concerne que les sites des voisins les plus proches. H et Δ sont respectivement le champ magnétique externe et le champ cristallin [66].

I.2.2.4 Modèle de Blume-Capel

Le modèle de spin de Blume-Capel est un cas particulier du modèle BEG présenté ci-dessus lorsque $K=0$. Il correspond au système d'Ising ferromagnétique à spin-1. Il a été introduit au début par Blume en 1966 pour expliquer la transition de phase magnétique de premier ordre dans le dioxyde d'uranium UO_2 [67], après, Capel a généralisé ce modèle de spin en tant que modèle théorique pour présenter des transitions de phases magnétiques de premier ordre [68]. L'hamiltonien est donné donc par l'équation :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \Delta \sum_i S_i^2 - H \sum_i S_i \quad (I.12)$$

On distingue les cas particuliers suivants :

$\Delta = -\infty$, le système est réduit au modèle d'Ising de spin $1/2$ qui représente un ordre magnétique $S_i \neq 0$ à basses températures.

$\Delta = 0$, ce cas correspond au modèle d'Ising avec $S_i = 1$ qui représente un ordre magnétique à basses températures.

$\Delta = +\infty$, le système est réduit dans le cas où $S=0$ sans ordre magnétique $S_i = 0$.

Ce modèle de spin sera utilisé dans les chapitres suivantes pour explorer les propriétés magnétiques de quelques nanostructures.

I.2.2.5 Modèle de Potts

Le modèle de Potts est un autre modèle de spin parmi les modèles les plus utilisés en physique statistique. C'est un modèle qui régit les interactions au sein d'un réseau cristallin, il est utilisé aussi pour expliquer certains phénomènes relatifs à la physique des solides tels que les transitions de phase [69]. Elle est similaire au modèle d'Ising, le spin S_i sur chaque site du réseau peut prendre plus de deux valeurs discrètes différentes [70]. Le spin S_i peut prendre, habituellement, des valeurs entières jusqu'à N état ($S_i = 1 \dots N$). L'hamiltonien du modèle est donné par l'équation :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{ij} S_i S_j \quad (I.13)$$

δ_{ij} , est le symbole de Kronecker qui satisfait :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (\text{I.14})$$

Lorsque le nombre des états est fixé à $N=2$, le modèle de Potts est équivalent au modèle d'Ising. L'hamiltonien s'écrit donc par l'équation :

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle i,j \rangle} 2 \left(\delta_{ij} S_i S_j - \frac{1}{2} \right) - \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2}J \quad (\text{I.15})$$

avec :

$$\begin{cases} \text{si } S_i = S_j \mapsto 2 \left(\delta_{ij} S_i S_j - \frac{1}{2} \right) = 1 \\ \text{si } S_i \neq S_j \mapsto 2 \left(\delta_{ij} S_i S_j - \frac{1}{2} \right) = -1 \end{cases} \quad (\text{I.16})$$

Pour $N > 2$ il en résulte le modèle de Potts qui transite le système de l'état ferromagnétique à l'état paramagnétique [63]. Ce modèle est équivalent au modèle d'Ising plus la constante $-\sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2}J$.

I.2.2.6 Modèle XY

Dans ce modèle, les spins sont des vecteurs dans un plan à deux dimensions (x,y), avec des composantes de norme unité. Ces vecteurs peuvent s'orienter dans n'importe quelle direction [70]. L'hamiltonien est exprimé par l'équation :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{h} \sum_i \vec{S}_i \quad (\text{I.17})$$

Où J représente le couplage d'échange, \vec{h} est le champ magnétique externe et \vec{S}_i , est un opérateur de spin avec $S^2 = S_x^2 + S_y^2 = 1$. Ce modèle peut être représenté aussi par une variable angulaire qui indique la direction de spin. L'hamiltonien devient :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - \sum_i [h_x \cos(\theta_i) + h_y \sin(\theta_i)] \quad (\text{I.18})$$

où θ_i et θ_j , représentent les variables angulaires correspondant aux directions des spins.

I.2.2.7 Modèle d'Heisenberg

Le modèle d'Heisenberg est similaire au modèle XY bien que dans ce modèle les spins sont des vecteurs unitaires à trois dimensions avec $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 1$. Ce modèle de spin permet de traiter directement la dépendance en spin d'un système de plusieurs électrons. L'hamiltonien est donné dans ce cas par l'équation :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_{xi}S_{xj} + S_{yi}S_{yj} + S_{zi}S_{zj}) - \sum_i (H_x S_{xi} + H_y S_{yi} + H_z S_{zi}) \quad (I.19)$$

où H_x , H_y et H_z sont les trois composantes du champ magnétique externe suivant les axes X, Y et Z.

I.2.3 Conditions aux bords

Dans le but d'établir une extrapolation à la limite thermodynamique, il est primordial de poser certaines conditions aux limites.

I.2.3.1 Conditions aux limites périodiques

Dans un système infini, les limites peuvent être efficacement éliminées en enveloppant le réseau de dimension d , sur un tore de dimension $(d+1)$, de sorte que le premier spin d'une rangée est connecté avec le dernier spin de la rangée comme un voisin le plus proche et vice versa [64], comme il est schématisé sur la figure I-11(a). Cette condition est appelée condition aux limites périodiques ou condition cyclique.

I.2.3.2 Conditions aux limites périodiques vis

La mise en œuvre réelle d'une condition aux limites « enveloppante » est plus facile en représentant les spins sur le réseau sous forme d'entrées dans un vecteur unidimensionnel qui est enroulé autour du système. Par conséquent, le dernier spin dans une rangée voit le premier spin dans la rangée suivante comme le plus proche voisin [64], comme illustré sur la figure I-11(b).

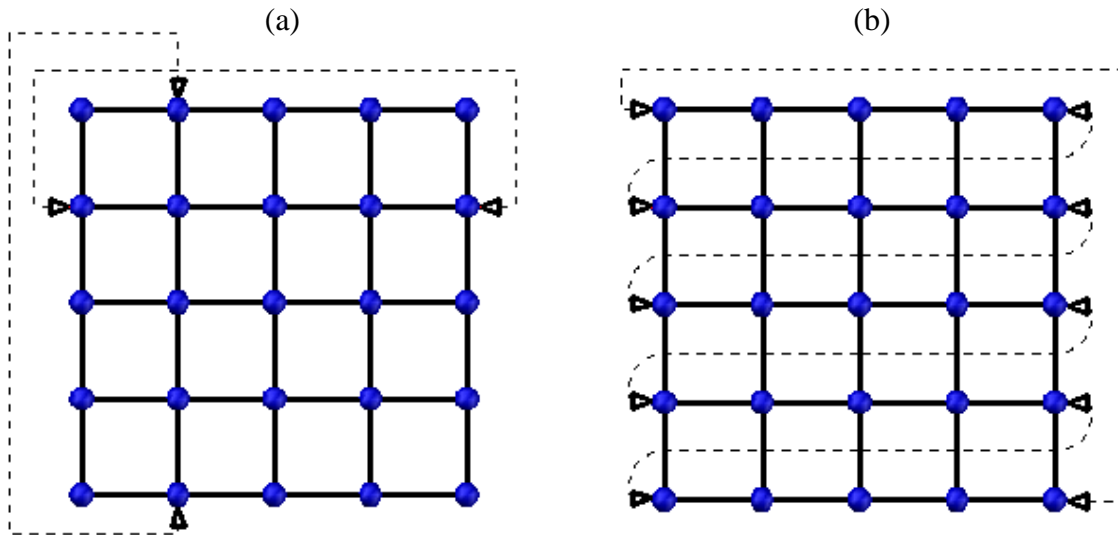


Figure I-11: Application des conditions aux limites typiques pour un système bidimensionnel : (a) Conditions aux limites périodiques. (b) Conditions aux limites périodiques vis.

I.2.3.3 Conditions aux limites antipériodiques

Les conditions aux limites antipériodiques est prise en considération, si des conditions aux limites périodiques sont imposées avec une modification tel que le signe du couplage est inversé à la frontière. Cette procédure, n'est pas utile pour rendre le système plus fin, mais a pour effet statutaire de nous permettre de travailler avec une seule interface dans le système. Avec des conditions aux limites périodiques, les interfaces ne peuvent exister que par paires [64]. Dans cette situation, l'interface n'est pas fixée à un endroit particulier et peut se déplacer d'avant en arrière à travers la frontière. On applique les conditions limites antipériodiques dans la direction normale à l'interface étudiée et on applique les conditions périodiques dans les autres directions.

I.2.3.4 Conditions aux limites antisymétriques

Ce type de condition aux limites périodique a été introduite explicitement pour les systèmes à tourbillons. Les tourbillons sont des excitations topologiques qui se produisent plus particulièrement dans le modèle bidimensionnel de $L \times L$. En connectant le dernier spin de la rangée (n) de manière antiferromagnétique avec le premier spin consécutif ($L-n$). Il s'agit d'une condition aux limites assez spéciale qui n'est utile que pour un nombre limité de cas, mais elle est un exemple de la façon dont les frontières peuvent être utilisées pour l'étude d'excitations inhabituelles [64].

I.2.3.5 Conditions aux limites de bord libre

Les conditions aux limites de bord libre n'impliquent aucun type de connexion entre la fin d'une ligne et toute autre ligne du réseau. Au lieu de cela, les tours à la fin d'une rangée ne voient aucun voisin dans cette direction comme il est donné sur la figure I-12. Cependant, des changements très importants peuvent se produire près des surfaces et le comportement du système n'est pas homogène, et le comportement de la surface et des coins devient lui-même un sujet d'étude. Dans la modélisation des films minces, on utilise les conditions aux limites périodiques dans les directions parallèles au film et des conditions aux limites du bord libre dans la direction normale au film [64].

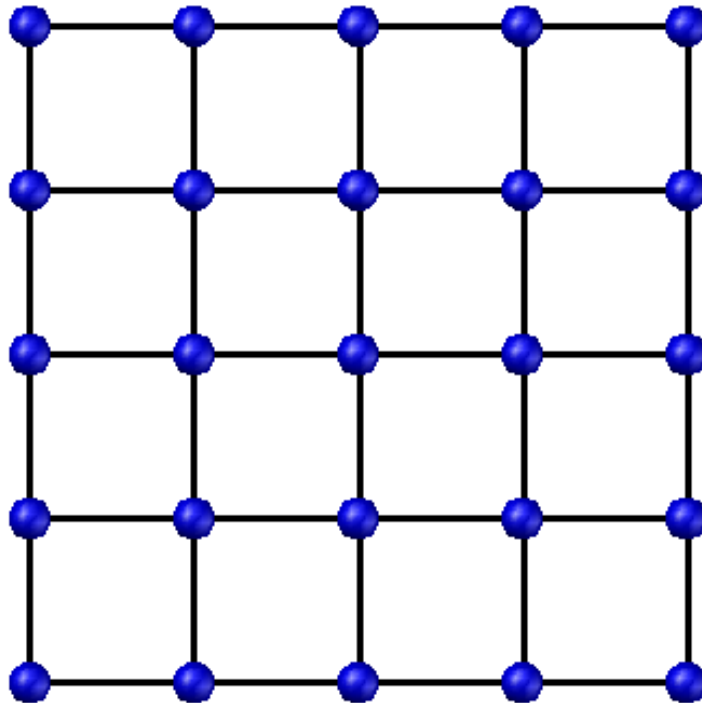


Figure I-12: Conditions aux limites de bords libres dans un système bidimensionnel

I.2.3.6 Conditions aux limites du champ moyen

Une autre façon de réduire les effets de taille finie consiste à introduire un champ efficace qui n'agit que sur les spins limites et qui est ajusté pour maintenir l'aimantation à la limite égale à l'aimantation moyenne du système.

I.2.4 Simulation par la méthode de Monte Carlo

I.2.4.1 Principe de la méthode Monte Carlo

Le principe de la méthode de Monte Carlo est basé sur la simulation des fluctuations thermiques aléatoires du système d'un état $\{a\}$ à un autre état $\{b\}$. La probabilité de trouver le système dans l'état $\{a\}$, pendant la simulation, est égale au poids de cet état dans le système réel. C'est pour cette raison qu'il est primordial de poser une loi qui régit le passage d'un état à l'autre pendant la simulation des fluctuations thermiques. La méthode Monte Carlo constitue un moyen informatique adéquat pour la compréhension de phénomènes physiques complexes tels ceux rencontrés dans le cas des réseaux et structures des matériaux ou systèmes magnétiques. La simulation Monte Carlo est basée sur les étapes suivantes :

- ✓ Estimation
- ✓ Échantillon important
- ✓ Processus de Markov
- ✓ Ergodicité
- ✓ Balance détaillée
- ✓ Probabilité d'acceptation

I.2.4.2 Estimation

Le but habituel dans la simulation Monte Carlo d'un système thermique est le calcul de la valeur d'une quantité observable Q , telle que l'énergie interne dans un modèle de gaz, la susceptibilité la chaleur spécifique ou l'aimantation dans un modèle magnétique. En faisant la moyenne de cette quantité sur tous les états du système, en pondérant chacun avec sa propre probabilité de Boltzmann P_a [64,71] :

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

$\beta = \frac{1}{K_B T}$, est la température inverse mise à l'échelle par la constante de Boltzmann K_B . Z est la fonction de répartition du système.

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

Mais ce principe n'est utile que dans les plus petits systèmes. Dans les grands systèmes, on fait la moyenne sur un sous-ensemble d'états, bien que cela introduise nécessairement une certaine imprécision dans le calcul. Les techniques de Monte Carlo fonctionnent en choisissant un sous-ensemble d'états au hasard dans une distribution de probabilité que nous spécifions. Supposons que nous choisissons M de tels états $\{a_1, a_2, \dots, a_M\}$. Notre meilleure estimation de la quantité Q sera alors donnée par :

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{ai} P_{ai}^{-1} e^{-\beta E_{ai}}}{\sum_{j=1}^M P_{aj}^{-1} e^{-\beta E_{aj}}} \quad (I.22)$$

Q_M est appelé l'estimateur de Q . Il a la propriété que, comme le nombre M d'états échantillonnés augmente, il devient une estimation de plus en plus précise de $\langle Q \rangle$. Autrement, lorsque $M \rightarrow \infty$ on a $Q_M = \langle Q \rangle$. L'essentiel est de savoir comment choisir les états M afin que Q_M soit une estimation précise de $\langle Q \rangle$. En d'autres termes, comment choisir la distribution de probabilité P_a . Le choix le plus simple est de choisir tous les états avec une probabilité égale à P_a .

En substituant ce choix à l'équation précédente, on obtient :

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

L'estimateur donné dans l'équation (I.23) n'est pas une meilleure estimation de la valeur de $\langle Q \rangle$ dans ces circonstances. La raison en est que l'une ou les deux des sommes figurant dans l'équation (I.20) peuvent être dominées par un petit nombre d'états. Tous les autres états ont une contribution négligeable même lorsque nous les additionnons tous ensemble. Cet effet est particulièrement évident à basses températures, où ces sommes peuvent être dominées par une centaine d'états, ou dix états, ou même un état, car à basses températures, il n'y a pas assez d'énergie thermique pour soulever le système dans les états excités supérieurs, et il passe donc presque tout son temps à l'état fondamental, ou l'un des plus bas des états excités.

I.2.4.3 Échantillon important

Pour être sûr que la moyenne d'une observable est précise, nous choisissons les états M de sorte que la probabilité qu'un état particulier $\{a\}$ soit choisi est P_a . Prendre en considération un échantillon contenant les états dominants constitue l'une des étapes primordiales dans la méthode Monte Carlo [72]. Alors notre estimateur pour $\langle Q \rangle$, devient :

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{ai} \quad (\text{I.24})$$

A noter que le facteur de Boltzmann est annulé de l'estimateur, laissant une expression particulièrement simple. Cette définition de Q fonctionne beaucoup mieux, surtout lorsque le système passe la majorité de son temps dans un petit nombre d'états, par exemple, les températures les plus bas, car ce seront précisément les états que nous choisirons le plus souvent, et la fréquence relative avec laquelle nous les choisirons correspondra exactement au temps que le système réel passerait dans ces états [73].

Pour donner de plus une meilleure estimation Q , nous choisissons nos états pour que chaque état apparaisse avec sa probabilité de Boltzmann correcte. Dans la suite, nous décrivons la solution standard du problème, qui utilise un processus de Markov.

I.2.4.4 Processus de Markov

Un processus de Markov est un processus qui ne dépend que de l'état initial du système et n'a besoin d'aucune information sur le passé pour faire une prédiction sur l'avenir [64]. Si l'on donne un état initial des sites occupés dans un réseau, le processus de Markov n'aurait pas besoin de connaître l'ordre de leur distribution pour faire une présomption sur les événements qui se produiraient par la suite. Une chaîne de Markov n'est alors qu'une séquence d'événements qui satisfont à la condition d'être un processus de Markov. Cette chaîne peut se propager en temps continu ou discret. La façon la plus simple de visualiser une chaîne de Markov est d'imaginer une séquence de lancers de pièces. Chaque événement est un tirage au sort unique auquel est associée une probabilité indépendante du tirage au sort précédent. Il est plus courant de voir un processus de Markov en physique, car peu importe comment un système est arrivé à un état. Si l'état initial est fourni, une prédiction peut être faite sur l'avenir du système. Par exemple,

compte tenu de la position et de l'impulsion d'une particule, les équations du mouvement peuvent être utilisées pour déterminer tous ses futurs états de position.

La partie délicate de la réalisation d'une simulation de Monte Carlo est la génération d'un ensemble aléatoire approprié d'états selon la distribution de probabilité de Boltzmann [74]. Pour commencer, on ne peut pas simplement choisir des états au hasard et les accepter ou les rejeter avec une probabilité proportionnelle à $e^{-\beta E}$, car nous finirions par rejeter pratiquement tous les états, étant donné que les probabilités de leur acceptation seraient exponentiellement faibles. Au lieu de cela, presque toutes les simulations Monte Carlo s'appuient sur les processus de Markov comme moteur de génération pour l'ensemble des états utilisés [75]. Le processus de Markov est un mécanisme qui, étant donné un système dans un état $\{a\}$, génère un nouvel état $\{b\}$ de ce système [76]. Il le fait de façon aléatoire ; il ne générera pas le même nouvel état à chaque fois qu'il recevra l'état initial $\{a\}$. La probabilité de générer l'état $\{b\}$ est appelée probabilité de transition $V(a \rightarrow b)$ pour la transition de $\{a\}$ vers $\{b\}$, et pour un véritable processus de Markov, toutes les probabilités de transition doivent satisfaire deux conditions : (1) elles ne doivent pas varier au fil du temps, et (2) ils ne devraient dépendre que des propriétés des états actuels $\{a\}$ et $\{b\}$, et non des autres états traversés par le système. Ces conditions signifient que la probabilité que le processus de Markov génère l'état $\{b\}$ lors de l'alimentation de l'état $\{a\}$ est la même à chaque fois qu'il est alimenté en l'état $\{a\}$, indépendamment de tout ce qui s'est produit. Les probabilités de transition $V(a \rightarrow b)$ doivent également satisfaire la contrainte :

$$\sum_b V(a \rightarrow b) = 1 \quad (\text{I.25})$$

Puisque le processus de Markov doit générer un état $\{b\}$ lorsqu'il reçoit un système dans l'état $\{a\}$. A noter que la probabilité de transition $V(a \rightarrow a)$, qui est la probabilité que le nouvel état généré soit le même que l'ancien, n'a pas besoin d'être nulle. Cela revient à dire qu'il peut y avoir une probabilité infinie que le processus de Markov reste simplement dans l'état $\{a\}$. Dans une simulation de Monte Carlo, nous utilisons un processus de Markov à plusieurs reprises pour générer une chaîne d'états de Markov. En commençant par un état $\{a\}$, nous utilisons le processus pour en générer un nouvel état $\{b\}$, puis nous introduisons cet état dans le processus pour générer un autre état $\{c\}$, et ainsi de suite. Le processus de Markov est choisi spécialement pour que lorsqu'il soit exécuté assez longtemps à partir de n'importe quel état du système, il

produise finalement une succession d'états qui apparaissent avec des probabilités données par la distribution de Boltzmann. Nous appelons le processus d'atteindre la distribution de Boltzmann « l'équilibre » car c'est exactement le processus qu'un système réel traverse lorsqu'il atteint l'équilibre à la température ambiante. Pour y parvenir, nous imposons deux conditions supplémentaires à notre processus de Markov, en plus de celles spécifiées ci-dessus, les conditions d'ergodicité et d'équilibre détaillé.

I.2.4.5 Ergodicité

La condition d'ergodicité est l'exigence selon laquelle notre processus Markov devrait pouvoir atteindre n'importe quel état du système à partir de n'importe quel autre état, si nous le faisons fonctionner assez longtemps. Ceci est nécessaire pour atteindre notre objectif déclaré de générer des états avec leurs probabilités de Boltzmann correctes. Chaque état b apparaît avec une probabilité P_b non nulle dans la distribution de Boltzmann, et si cet état était inaccessible à partir d'un autre état, peu importe la durée pendant laquelle nous continuons notre processus, notre objectif est contrecarré si nous commençons dans l'état $\{a\}$: la probabilité de trouver $\{b\}$ dans notre chaîne d'états de Markov sera nulle, et non P_b comme nous l'exigeons. La condition d'ergodicité nous dit que nous sommes autorisés à rendre certaines des probabilités de transition de notre processus de Markov nulles, mais qu'il doit y avoir au moins un chemin de probabilités de transition non nulles entre deux états que nous choisissons [76]. En pratique, la plupart des algorithmes de Monte Carlo mettent presque toutes les probabilités de transition à zéro.

I.2.4.6 Balance détaillée

La balance détaillée est l'autre condition que nous imposons à notre processus de Markov. Cette condition est celle qui garantit que c'est la distribution de probabilité de Boltzmann que nous générons après que notre système est parvenu à l'équilibre, plutôt que toute autre distribution [64]. Sa dérivation est assez subtile. On considère que le système est en équilibre si le taux auquel le système effectue des transitions vers et depuis n'importe quel état doit être égal. Mathématiquement, nous pouvons exprimer cela comme :

$$\sum_b P_a V(a \rightarrow b) = \sum_b P_b V(b \rightarrow a) \quad (\text{I.26})$$

En utilisant l'équation (I.25), nous pouvons simplifier ceci pour donner :

$$P_a = \sum_b P_b V(b \rightarrow a) \quad (\text{I.27})$$

Pour tout ensemble de probabilités de transition satisfaisant cette équation, la distribution de probabilité P_a sera un équilibre de la dynamique du processus de Markov. Cependant, le simple fait de satisfaire cette équation ne suffit pas pour garantir que la distribution de probabilité tendra à se stabiliser à partir de n'importe quel état du système si nous exécutons le processus assez longtemps. Nous pouvons le démontrer comme suit. Les probabilités de transition $P(a \rightarrow b)$ peuvent être considérées comme les éléments d'une matrice V . Cette matrice est appelée matrice de Markov ou matrice stochastique pour le processus de Markov. Prenons $w_a(t)$ la probabilité que notre système soit dans un état $\{a\}$ au temps t . Si nous mesurons le temps par étapes le long de notre chaîne de Markov, alors la probabilité $w_b(t+1)$ d'être dans l'état $\{b\}$ au temps $t+1$ est donnée par :

$$w_b(t+1) = \sum_a V(a \rightarrow b) w_a(t) \quad (\text{I.28})$$

En notation matricielle, cela devient :

$$W(t+1) = V \cdot W(t) \quad (\text{I.29})$$

où $W(t)$ est le vecteur dont les éléments sont les poids $w_a(t)$. Si le processus de Markov atteint un état d'équilibre simple $w(\infty)$ comme $t \rightarrow \infty$, alors cet état satisfait :

$$W(\infty) = V \cdot W(\infty) \quad (\text{I.30})$$

Cependant, il est également possible que le processus atteigne un équilibre dynamique dans lequel la distribution de probabilité w tourne autour d'un certain nombre de valeurs différentes. Une telle rotation est appelée cycle limite. Dans ce cas, $w(\infty)$ satisferait

$$W(\infty) = V^n \cdot W(\infty) \quad (\text{I.31})$$

où n est la longueur du cycle limite. Si nous choisissons nos probabilités de transition (ou de manière équivalente notre matrice de Markov) pour satisfaire l'équation (I.27), nous garantissons que la chaîne de Markov aura une distribution de probabilité d'équilibre simple P_a

mais elle peut aussi avoir un nombre quelconque de cycles limites de la forme de l'équation (I.31). Cela signifie qu'il n'y a aucune garantie que les états réels générés auront quelque chose comme la distribution de probabilité souhaitée. Nous contourons ce problème en appliquant une condition supplémentaire à nos probabilités de transition :

$$P_a V(a \rightarrow b) = P_b V(b \rightarrow a) \quad (\text{I.32})$$

C'est la condition de balance détaillée. Il est clair que tout ensemble de probabilités de transition qui satisfait à cette condition satisfait également à l'équation (I.26). Revenons maintenant à l'équation (I.32). Nous pouvons exprimer cette équation en notation matricielle :

$$P = PV \quad (\text{I.33})$$

L'équation d'équilibre détaillée nous dit alors que les probabilités de transition devraient satisfaire :

$$\frac{V(a \rightarrow b)}{V(b \rightarrow a)} = \frac{P_b}{P_a} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{I.34})$$

Cette équation avec l'équation (I.25) sont les contraintes sur notre choix de probabilités de transition $V(a \rightarrow b)$. Si nous remplissons ces conditions, ainsi que la condition d'ergodicité, alors la distribution d'équilibre des états dans le processus de Markov sera la distribution de Boltzmann. Notre objectif est alors d'écrire un programme informatique qui implémente le processus de Markov correspondant à ces probabilités de transition afin de générer une chaîne d'états. Après avoir attendu un temps suffisant pour permettre à la distribution de probabilité des états $w_a(t)$ de se rapprocher suffisamment de la distribution de Boltzmann, nous faisons la moyenne d'observable Q qui nous intéresse sur M états et nous calculons l'estimateur Q_M défini dans l'équation (I.24). Un certain nombre de raffinements sur ce plan sont possibles, mais c'est le principe de base sur lequel tous les calculs de Monte Carlo d'équilibre modernes sont basés.

I.2.4.7 Probabilité d'acceptation

Maintenant, nous pouvons ajuster la valeur de tout $V(a \rightarrow b)$ et garder la règle de somme donnée dans l'équation (I.25) satisfaite, en compensant simplement cet ajustement par un ajustement égal mais opposé de $V(a \rightarrow a)$. La seule chose que nous devons surveiller est que

$V(a \rightarrow a)$ ne sort jamais de sa plage autorisée entre zéro et un. Si nous faisons un ajustement comme celui-ci dans $V(a \rightarrow b)$, nous pouvons également faire en sorte que l'équation (I.34) reste satisfaite, en effectuant simultanément un changement dans $V(b \rightarrow a)$, de sorte que le rapport des deux est préservé [77]. Il s'avère que ces considérations nous donnent en fait suffisamment de liberté pour que nous puissions faire en sorte que les probabilités de transition prennent n'importe quel ensemble de valeurs en ajustant les valeurs des probabilités $V(a \rightarrow a)$. Pour voir cela, nous divisons la probabilité de transition en deux parties :

$$V(a \rightarrow b) = f(a \rightarrow b)D(a \rightarrow b) \quad (\text{I.35})$$

La quantité $f(a \rightarrow b)$ est la probabilité de sélection, qui est la probabilité, étant donné un état initial $\{a\}$, que notre algorithme génère un nouvel état $\{b\}$, et $D(a \rightarrow b)$ est la probabilité d'acceptation. La probabilité d'acceptation dit que si nous partons d'un état $\{a\}$ et que notre algorithme génère un nouvel état $\{b\}$, nous devons accepter cet état et changer notre système au nouvel état $\{b\}$ une fraction du temps $D(a \rightarrow b)$. Cependant, nous devrions simplement rester dans l'état $\{a\}$. Nous sommes libres de choisir la probabilité d'acceptation comme n'importe quel nombre entre zéro et un ; le choisir à zéro pour toutes les transitions équivaut à choisir $P(a \rightarrow a) = 1$, qui est la plus grande valeur qu'il peut prendre et signifie que nous ne quitterons jamais l'état $\{a\}$. Cela nous donne une liberté totale sur la façon dont nous choisissons les probabilités de sélection $f(\mu \rightarrow \nu)$, car la contrainte basée dans l'équation (I.34) ne fixe que le rapport :

$$\frac{V(a \rightarrow b)}{V(b \rightarrow a)} = \frac{f(a \rightarrow b)D(a \rightarrow b)}{f(b \rightarrow a)D(b \rightarrow a)} \quad (\text{I.36})$$

Le rapport $D(a \rightarrow b) / D(b \rightarrow a)$ peut prendre n'importe quelle valeur que nous choisissons entre zéro et l'infini, ce qui signifie que $f(a \rightarrow b)$ et $f(b \rightarrow a)$ peuvent prendre toutes les valeurs que nous voulons. Cependant, la meilleure chose que nous puissions faire pour maintenir des probabilités d'acceptation élevés est d'essayer d'incarner dans les probabilités de sélection $f(a \rightarrow b)$ autant que possible la dépendance de $V(a \rightarrow b)$ sur les caractéristiques des états $\{a\}$ et $\{b\}$, et mettre le moins possible dans le taux d'acceptation. L'algorithme idéal est celui dans lequel les nouveaux états sont sélectionnés avec exactement les probabilités de transition correctes tout le temps, et le rapport d'acceptation est toujours un. Un bon algorithme est celui dans lequel la probabilité d'acceptation est généralement proche de 1.

I.2.4.8 Algorithme de Metropolis

L'algorithme Metropolis [62] est l'algorithme de Monte-Carlo le plus célèbre et le plus utilisé. Il a été présenté par Nicolas Metropolis et al dans un article en 1953 sur les simulations de gaz dans les sphères dures [78]. La dérivation de l'algorithme Metropolis suit exactement le plan de Monte Carlo décrit ci-dessus. Nous choisissons un ensemble de probabilités de sélection $f(a \rightarrow b)$, une pour chaque transition possible d'un état à un autre, puis nous choisissons un ensemble de probabilités d'acceptation $D(a \rightarrow b)$ telles que satisfait à la condition d'équilibre détaillé. L'algorithme fonctionne en choisissant à plusieurs reprises un nouvel état $\{b\}$, puis en l'acceptant ou en le rejetant au hasard avec la probabilité d'acceptation choisie. Si l'état est accepté, le programme change le système au nouvel état $\{b\}$. Sinon, il le laisse tel quel est. Et puis le processus se répète. Les probabilités de sélection $f(a \rightarrow b)$ doivent être choisies de façon à ce que la condition d'ergodicité (exigence que chaque état soit accessible les uns aux autres en un nombre fini d'étapes) soit remplie. Cependant, les énergies des systèmes en équilibre thermique restent dans une plage très étroite (fluctuations énergétiques faibles par rapport à l'énergie de l'ensemble du système). Le moyen le plus simple d'y parvenir dans le modèle d'Ising est de ne considérer que les états qui diffèrent de l'état actuel par le retournement d'un seul spin. On dit qu'un algorithme qui fait cela a une dynamique de retournement de spin unique.

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

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

Avec ces probabilités de sélection, la condition de l'équilibre détaillé, prend la forme :

$$\frac{V(a \rightarrow b)}{V(b \rightarrow a)} = \frac{f(a \rightarrow b)D(a \rightarrow b)}{f(b \rightarrow a)D(b \rightarrow a)} = \frac{D(a \rightarrow b)}{D(b \rightarrow a)} = e^{-\beta(E_b - E_a)} \quad (\text{I.38})$$

Maintenant, nous devons choisir les rapports d'acceptation $D(a \rightarrow b)$ pour satisfaire cette équation. La seule possibilité est de choisir :

$$D(a \rightarrow b) = D_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(Eb-Ea)} \quad (I.39)$$

La constante de proportionnalité D_0 est exclue de l'équation (I.38), nous pouvons donc choisir n'importe quelle valeur pour celle-ci, sauf que $D(a \rightarrow b)$, étant une probabilité, ne devrait jamais être autorisée à devenir supérieur à un. La plus grande différence d'énergie que nous pouvons avoir entre deux états est $2zJ$, où z est le nombre de coordination du réseau. Cela signifie que la plus grande valeur du terme $e^{-\frac{1}{2}\beta(Eb-Ea)}$ est $e^{\beta zJ}$. Ainsi, afin d'assurer que $D(a \rightarrow b) \leq 1$, on écrit :

$$D_0 \leq e^{-\beta zJ} \quad (I.40)$$

Pour rendre l'algorithme aussi efficace que possible, on cherche à ce que les probabilités d'acceptation soient aussi grandes que possible, donc nous faisons D_0 aussi grand qu'il est permis d'être, ce qui nous donne :

$$D(a \rightarrow b) = e^{-\frac{1}{2}\beta(Eb-Ea+2zJ)} \quad (I.41)$$

En utilisant cette probabilité d'acceptation, nous pouvons effectuer une simulation Monte Carlo du modèle d'Ising, et il échantillonnera correctement la distribution de Boltzmann. Cependant, la simulation sera très inefficace, car le taux d'acceptation est très faible pour presque tous les mouvements. La solution à ce problème est la suivante. Dans l'équation (I.39), nous avons supposé une forme fonctionnelle particulière pour le rapport d'acceptation, mais la condition d'équilibre détaillé, dans l'équation (I.38), n'exige pas réellement qu'elle prenne cette forme et ne spécifie que le rapport des paires de probabilités d'acceptation. En fait, la façon de maximiser les probabilités d'acceptation (et donc de produire l'algorithme le plus efficace) est toujours de donner au plus grand des deux probabilités la plus grande valeur possible, puis d'ajuster l'autre pour satisfaire la contrainte. Pour voir comment cela fonctionne dans ce cas, si on a deux états $\{a\}$ et $\{b\}$ $E_a < E_b$. Alors le plus grand des deux rapports d'acceptation est $D(b \rightarrow a)$, donc nous mettons égale à un. Pour satisfaire l'équation (I.38), $D(a \rightarrow b)$ doit alors avoir la valeur $e^{-\beta(Eb-Ea)}$. Ainsi, l'algorithme optimal est celui dans lequel :

$$D(a \rightarrow b) = \begin{cases} e^{-\beta(Eb-Ea)} & \text{si } Eb - Ea > 0 \\ 1 & \text{autres cas} \end{cases} \quad (\text{I.42})$$

En d'autres termes, si nous sélectionnons un nouvel état qui a une énergie inférieure ou égale à l'actuelle, nous devons toujours accepter la transition vers cet état. S'il a une énergie plus élevée, nous l'acceptons peut-être, avec la probabilité donnée ci-dessus. L'équation (I.42) est le plus optimal, car il rejette parfois les mouvements vers une énergie plus faible. Cependant, l'algorithme de Metropolis satisfait la balance détaillée, et il est l'algorithme le plus efficace. Donc, il est devenu l'algorithme de choix dans la majorité des études des simulations Monte Carlo. Les étapes suivantes sont primordiales pour établir un algorithme de Metropolis :

- Choisir un état et une configuration initiale qui donne l'orientation des spins du système étudié.
- Choisir un site « i » au hasard et envisager comme tentative de mouvement le retournement de spin.
- Calculer le changement d'énergie ΔE qui résulte si le spin au site « i » est renversé.
- Si $\Delta E \leq 0$, c'est-à-dire, le retournement du spin diminue l'énergie ou il la garde invariante, on accepte donc la nouvelle configuration.
- Si $\Delta E > 0$, on génère un nombre aléatoire r tel que $0 < r < 1$.
- Si $r < e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$ on accepte la configuration et on retourne le spin sinon on la rejette et la configuration à l'étape suivante est identique à la configuration précédente.
- Aller sur le site suivant.

Un organigramme de l'algorithme de Metropolis est donné dans l'annexe 3.

I.2.4.9 Détermination des grandeurs physique à l'équilibre

Un programme de simulation Monte Carlo tourne longtemps avant d'atteindre l'équilibre. Plus le programme prend assez de temps plus on gagne en termes de précision et de qualité des résultats obtenus, mais en revanche, il est primordial de tourner le programme par des ordinateurs avec de meilleures performances. On définit ce temps par les étapes Monte Carlo. Après que le programme atteint l'équilibre, on détermine sur une nouvelle période l'estimation des grandeurs physiques (énergie, aimantation, susceptibilité magnétique, Binder cumulant, chaleur spécifique...).

L'énergie totale dans le système est déterminée à la base de l'hamiltonien du système par l'équation :

$$E = \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle \quad (\text{I.43})$$

L'aimantation totale du système M est la somme globale des spins du système :

$$M = \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (\text{I.44})$$

La susceptibilité magnétique totale χ est calculée à la base de la formule de l'aimantation précédente :

$$\chi = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (\text{I.45})$$

On exploite aussi la formule de l'aimantation totale donnée ci-dessus pour déterminer le Binder cumulant (ou le cumulant du quatrième ordre) qui est un paramètre physique fréquemment utilisé pour déterminer avec précision les points de transition de phase dans les simulations numériques [79–83]. Il est exprimé par l'équation suivante :

$$U = 1 - \frac{\langle M \rangle^4}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad (\text{I.46})$$

La chaleur spécifique C_V du système peut être déterminée en se basant sur la formule de l'énergie totale donnée en haut [20,24,84] :

$$C_V = \frac{1}{N\beta^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (\text{I.47})$$

I.2.5 Estimation des erreurs statistiques

Comme pour toutes les mesures obtenues par les approches théoriques ou par les expériences, les erreurs sur les résultats de Monte Carlo se divisent en deux classes : les erreurs statistiques et les erreurs systématiques. Les erreurs statistiques sont des erreurs qui surviennent à la suite de changements aléatoires dans le système, provoqués par les fluctuations thermiques. Les erreurs systématiques, par contre, sont des erreurs dues à la procédure que nous avons utilisée

pour effectuer les mesures, et elles affectent toute la simulation. Un exemple est l'erreur introduite en attendant qu'un temps limité pour que notre système soit totalement en équilibre. Idéalement, nous devrions prévoir un temps infini pour cela, afin d'être sûr que le système soit complètement équilibré.

I.2.6 Conditions d'application de la méthode de Monte Carlo

Dans tous nos travaux que nous allons traiter dans les chapitres suivants, les conditions aux limites libres ont été prises en compte pour l'étude des propriétés magnétiques de chaque structure selon son hamiltonien. Les configurations ont été générées en balayant chaque structure par un retournement à un seul spin. Les calculs ont été générés selon la distribution de Boltzmann, où l'algorithme accepte ou rejette les configurations. Nous générons 10^6 pas de Monte Carlo par tour. Les 10^5 premières étapes de Monte Carlo ont été éliminées pour atteindre l'équilibre.

I.2.7 Méthode de Jackknife

La méthode de Jackknife [85] est une méthode d'estimation d'erreur. Pour l'application de cette méthode, nous avons besoin de choisir n échantillons indépendants parmi ceux qui ont été choisis pendant les calculs et les simulations, en prenant un échantillon tous les deux temps de corrélation. En appliquant la méthode de Jackknife au cas de la chaleur spécifique (que nous allons traiter dans le troisième chapitre), nous utiliserons d'abord ces échantillons pour calculer une valeur c pour la chaleur spécifique. Cependant, nous calculons également n autres estimations c comme suit. Nous prenons notre ensemble de n mesures, et nous enlevons la première, en laissant $(n - 1)$ mesures, et nous calculons la chaleur spécifique c_1 de ce sous-ensemble. Ensuite, nous remettons le premier, mais supprimons le second et calculons c_2 de ce sous-ensemble, etc. Chaque c_i est la chaleur spécifique calculée avec la $i^{\text{ème}}$ mesure de l'énergie retirée de l'ensemble, laissant $(n - 1)$ mesures. On peut alors montrer qu'une estimation de l'erreur dans la valeur de c est donnée par la formule :

$$\sigma = \sqrt{\sum_{i=1}^n (c_i - c)^2} \quad (\text{I.48})$$

où « c » est l'estimation de la chaleur spécifique en utilisant toutes les données. La méthode Jackknife donne de bonnes estimations des erreurs pour de grands ensembles de données, et

lorsque la taille de l'ensemble de données devient infinie, elle donne des estimations exactes [86].

I.2.8 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre plusieurs paramètres concernant le comportement des grandeurs magnétiques telles que l'aimantation et la susceptibilité. Nous avons également donné un aperçu sur les modèles de spin théoriques. Le modèle d'Ising, en particulier, est le modèle de spin le plus utilisé dans le domaine de la physique statistique, les autres modèles de spin sont des modèles théoriques qui introduisent plus de paramètres physiques. Par ailleurs, nous avons exposé en détail la méthode de Monte Carlo qui constitue un moyen informatique adéquat pour la compréhension de phénomènes physiques complexes tels que ceux rencontrés dans le cas des systèmes magnétiques. Grâce à l'utilisation de cette méthode de simulation dans plusieurs de nos travaux de recherches, un certain nombre de résultats ont été obtenus. Nous traiterons quelques-uns en détail dans les chapitres qui suivent.

**CHAPITRE II: EFFET DE LA DILUTION SUR LA
TEMPERATURE DE COMPENSATION DANS UNE
STRUCTURE DE GRAPHENE**

II.1 Introduction

Depuis sa découverte, le graphène continue de susciter l'intérêt des chercheurs sous différents angles [87] en raison de la particularité de ses propriétés, que ce soit les propriétés magnétiques, électriques, mécaniques ou thermiques [88–90]. Le développement technologique dans l'industrie électronique nécessite la recherche de nouveaux matériaux avec des meilleures propriétés, en particulier ceux de faible taille et de faible poids [91–94]. De même, le nano-graphène attire plus l'attention, même en génie civil, du fait que ce matériau a de meilleures propriétés mécaniques que l'acier, comme sa densité et sa résistance [95]. Le graphène est un cristal en nid d'abeille bidimensionnel, composé d'une seule couche d'atomes de carbone [96]. De nombreuses études théoriques et expérimentales sur les propriétés magnétiques de ce matériau ont été réalisées, à l'aide de plusieurs méthodes. Wang et al [28] ont étudié une structure bicouches de nano-graphène dans un champ magnétique longitudinal à l'aide de la simulation de Monte Carlo. Ils ont présenté l'effet de l'anisotropie mono-ionique et du couplage d'échange intra-couche sur les propriétés magnétiques du nano-graphène. D'un autre côté, Guo et al [97] ont étudié certaines propriétés magnétiques d'une bicouches de type graphène dopé, en utilisant le modèle d'Heisenberg, une fonction de Green et l'approximation linéaire des ondes de spin. D'autres chercheurs ont présenté les propriétés magnétiques d'une structure de graphène bicouches avec des plans non équivalents, en utilisant des simulations de Monte Carlo [57,98–100].

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude des propriétés magnétiques d'un réseau en nid d'abeille bidimensionnel utilisant des simulations de Monte Carlo. Le système étudié est composé d'un seul plan de graphène, avec deux types d'atomes constitués des spins $\sigma = 3/2$ et $S = 5/2$. Nous considérons la présence d'une concentration de la dilution uniquement pour les atomes S . Le but de l'introduction de la dilution est de simuler la présence d'impuretés dans le système. Nous présentons et discutons d'abord la variation de l'aimantation totale avec la température pour plusieurs valeurs des paramètres des interactions de couplage d'échange. Nous étudions aussi l'effet de la dilution sur le comportement de la température de compensation du système. Enfin, les cycles d'hystérésis du nanoréseau en nid d'abeilles étudié seront établis pour plusieurs valeurs de la concentration de dilution.

II.2 Théorie et modèle

Dans la présente étude, le système est un sous-réseau en nid d'abeille bidimensionnel, formé de deux types d'atomes, disposés ensemble dans le même plan avec des spins mixtes $\sigma = 3/2$ et $S = 5/2$. La structure en nid d'abeilles est représentée sur la figure II-1, où le nombre total d'atomes est $N = N_{\sigma} + N_S = 45 + 45 = 90$.

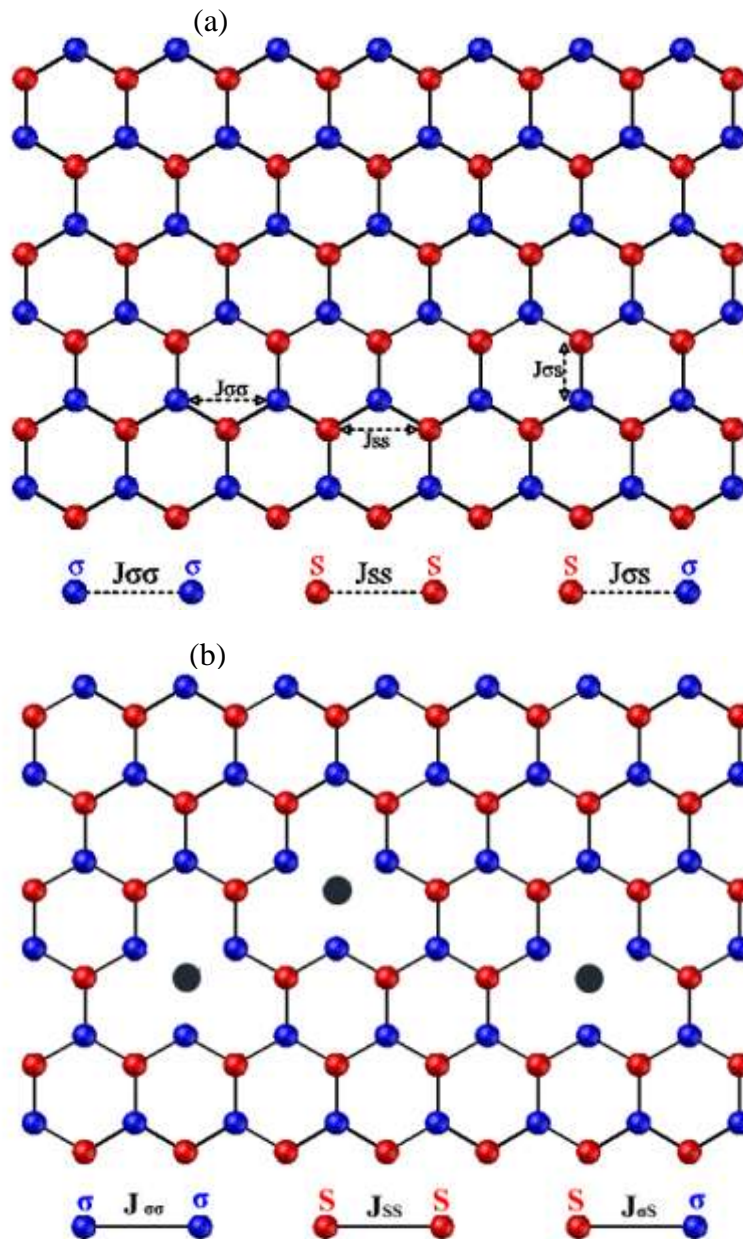


Figure II-1: Représentation du nanoréseau en nid d'abeille. (a): Dans le cas pur (b): avec dilution.

L'hamiltonien du système étudié, qui inclut les interactions entre les plus proches voisins, le champ cristallin et le champ magnétique externe, est donné comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i S_i \varepsilon_j S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} \sigma_k \sigma_l - J_{S\sigma} \sum_{\langle m,n \rangle} \varepsilon_m S_m \sigma_n \\ & - \Delta_S \sum_i (\varepsilon_i S_i)^2 - \Delta_\sigma \sum_j (\sigma_j)^2 - H \left(\sum_i \varepsilon_i S_i + \sum_j \sigma_j \right) \end{aligned} \quad (\text{II.1})$$

Les notations $\langle i, j \rangle$, $\langle k, l \rangle$ et $\langle m, n \rangle$ sont utilisées pour désigner les premiers sites voisins occupés par différents spins. Les paramètres J_{SS} , $J_{\sigma\sigma}$ et $J_{S\sigma}$ sont les constantes d'interaction de couplage d'échange entre les deux premiers spins voisins les plus proches (S-S), (σ - σ) et (S- σ), respectivement, comme ils ont été utilisés dans la réf. [23]. Les sommations montrées dans l'équation (II.1) remontent à tous les sites (i et j) du système. Les variables d'occupation sont des variables aléatoires éteintes non corrélées prenant les valeurs $\varepsilon_i = 1$ avec une probabilité p (site magnétique) ou $\varepsilon_i = 0$ avec une probabilité $1 - p$ (site non magnétique). H est le champ magnétique externe, Δ_S et Δ_σ représentent le champ cristallin des spins S et σ , respectivement. Par souci de simplicité, nous limiterons nos calculs, dans cette étude au cas particulier où : $\Delta = \Delta_S = \Delta_\sigma$.

Dans ce qui suit, et afin de simplifier la notation, nous utilisons les variables réduites : $R_{SS} = J_{SS}/J_{\sigma\sigma}$, $R_{S\sigma} = J_{S\sigma}/J_{\sigma\sigma}$, $h = H/J_{\sigma\sigma}$, température (t) = $T/J_{\sigma\sigma}$, $\delta = \Delta/J_{\sigma\sigma}$ et $J_{\sigma\sigma} = 1$. T étant la température.

Les aimantations partielles et totales pour le nanoréseau en nid d'abeille en présence de la dilution sont respectivement :

$$m_S = \frac{1}{pN_S} \sum_i \varepsilon_i S_i \quad (\text{II.2})$$

$$m_\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \sum_j \sigma_j \quad (\text{II.3})$$

$$m_{tot} = \frac{pN_S m_S + N_\sigma m_\sigma}{pN_S + N_\sigma} \quad (\text{II.4})$$

II.3 Résultats et discussions

II.3.1 Diagrammes de phases de l'état fondamental

Dans la présente section, nous étudions les diagrammes de phase de l'état fondamental du nanoréseau en nid d'abeilles avec des spins mixtes $\sigma = 3/2$ et $S = 5/2$, comme schématisé sur la figure II-1. Nous discutons des configurations d'énergie possibles dans différents plans à paramètres réduits.

Pour le système étudié, nous rappelons que le nombre d'états est : $2S + 1$ et $2\sigma + 1$ pour le spin S et σ respectivement. Par la suite, les configurations possibles sont : $(+5/2, +3/2, +1/2, -1/2, -3/2, -5/2)$ pour le spin S et $(-3/2, -1/2, +1/2, +3/2)$ pour le spin σ . Le nombre total de configurations possibles est alors donné par $4 \times 6 = 24$ configurations.

Afin d'inspecter l'effet du champ cristallin et le champ magnétique externe, nous présentons les résultats obtenus sur la figure II-2(a). Cette figure illustre les diagrammes des phases de l'état fondamental du système étudié dans le plan (δ, h) , pour la valeur fixe des paramètres réduits $R_{ss} = 0.5$ et $R_{s\sigma} = -0.5$. Nous avons trouvé seize configurations stables dans quatorze régions, à savoir: $(-1/2, +1/2)$; $(+1/2, +1/2)$; $(+3/2, +1/2)$; $(+3/2, +3/2)$; $(+3/2, +5/2)$; $(-3/2, +5/2)$; $(+3/2, -3/2)$ et $(+3/2, -1/2)$ pour h positif; $(+1/2, -1/2)$; $(-1/2, -1/2)$; $(-3/2, -1/2)$; $(-3/2, +1/2)$; $(-3/2, +3/2)$; $(-3/2, -3/2)$; $(3/2, -5/2)$ et $(+3/2, -5/2)$ pour h négatif. De plus, il existe deux grandes régions avec deux configurations simultanément. Car ces configurations ont la même énergie. La figure II-2(a) présente une symétrie parfaite du nombre de phases par rapport à l'axe $h = 0$.

Sur la figure II-2(b), nous présentons les diagrammes de phases de l'état fondamental du système étudié dans le plan $(R_{ss}, R_{s\sigma})$, en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe. Dans ce plan, il n'y a que six configurations stables, à savoir : $(-3/2, -1/2)$; $(-3/2, -3/2)$ et $(-3/2, -5/2)$ pour $R_{s\sigma}$ positif et $(-3/2, +1/2)$; $(-3/2, +3/2)$ et $(-3/2, +5/2)$ pour $R_{s\sigma}$ négatif. Ce plan ne présente une symétrie que par rapport à l'axe $R_{s\sigma} = 0$, dans le cas des spins S .

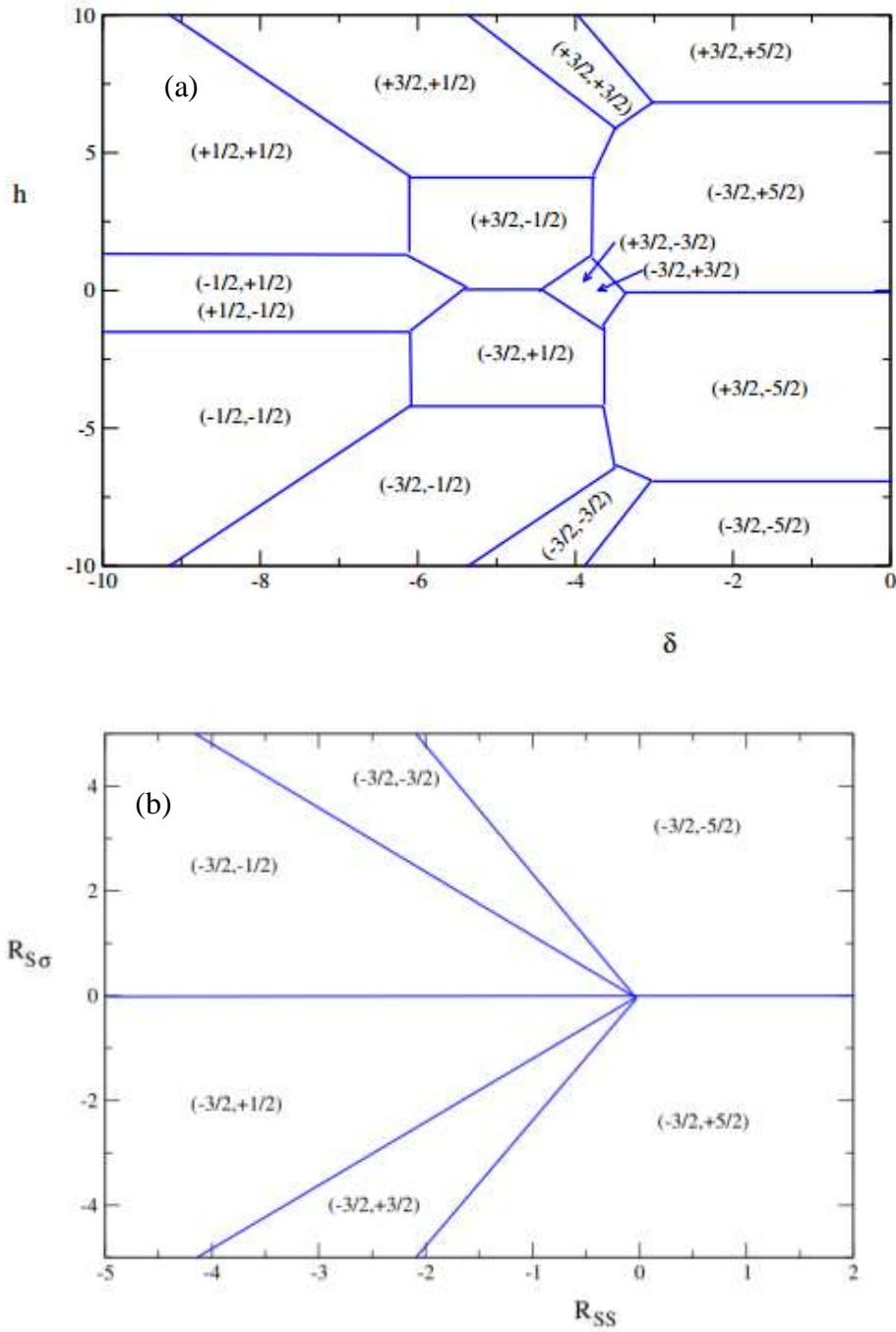


Figure II-2: Diagrammes de phases à l'état fondamental du réseau en nid d'abeille : (a) Dans le plan (δ, h) avec $R_{ss}=0.5$ et $R_{\sigma}=-0.5$. (b) Dans le plan $(R_{Ss}, R_{S\sigma})$ avec $h=0$ et $\delta=0$.

II.3.2 Simulation par la méthode de Monte Carlo

II.3.2.1 Variation des aimantations partielles et totale en fonction de la température

Dans cette partie, nous étudions les propriétés magnétiques du réseau en nid d'abeilles avec des spins mixtes $\sigma = 3/2$ et $S = 5/2$. Le système se compose du nombre total de spins $N_S = N_\sigma = 90$, où $N_S = N_\sigma = 45$.

La figure II-3 illustre le comportement thermique des aimantations partielles et totales du système étudié pour des valeurs fixes des paramètres réduits $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $p=1$, $h = 0$ et $\delta = 0$, dans le cas pur ($p = 1$). Cette figure présente une température de compensation réduite localisée à $t_{\text{comp}} = 5.5$ et une température de transition $t_c = 8.7$. La température t_{comp} correspond au passage de l'aimantation totale des valeurs négatives aux valeurs positives, tandis que la température t_c délimite les phases ferrimagnétique et paramagnétique. L'existence de la température de compensation a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche [101–103].

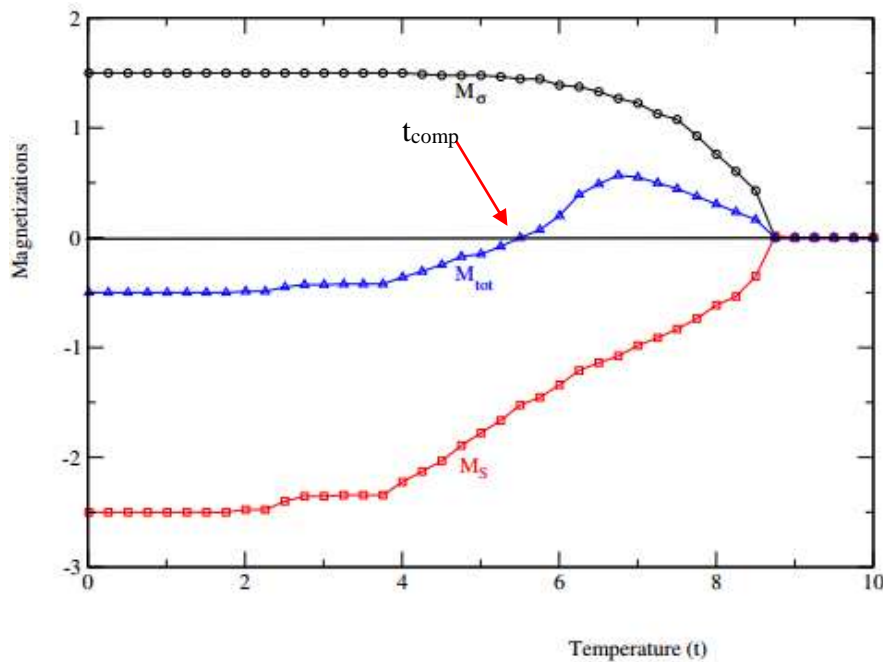


Figure II-3: Aimantations en fonction de la température pour des valeurs fixes des paramètres $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $p=1$, $h = 0$ et $\delta = 0$.

II.3.2.2 Effet du couplage d'échange sur le comportement de l'aimantation totale

Afin de montrer l'effet de l'interaction de couplage d'échange R_{SS} sur l'aimantation totale dans le cas pur ($p = 1$), nous fournissons les résultats obtenus sur la figure II-4. Cette figure est tracée pour différentes valeurs de l'interaction de couplage d'échange R_{SS} , avec une valeur sélectionnée du paramètre réduit $R_{S\sigma} = -0.3$ en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe.

La température de compensation apparaît car la somme des aimantations partielles des deux sous-réseaux (constituant le système étudié) est compensée, conduisant à une valeur nulle de l'aimantation totale. Nous constatons que la température de compensation diminue en diminuant la valeur du paramètre de couplage d'échange R_{SS} . Ceci est dû au fait que nous avons maintenu constante l'interaction de couplage d'échange $R_{S\sigma}$ avec une valeur négative et nous avons diminué la valeur du couplage d'échange réduit R_{SS} entre les spins S . De plus, la variation du paramètre R_{SS} n'a aucun effet sur la température de transition t_c .

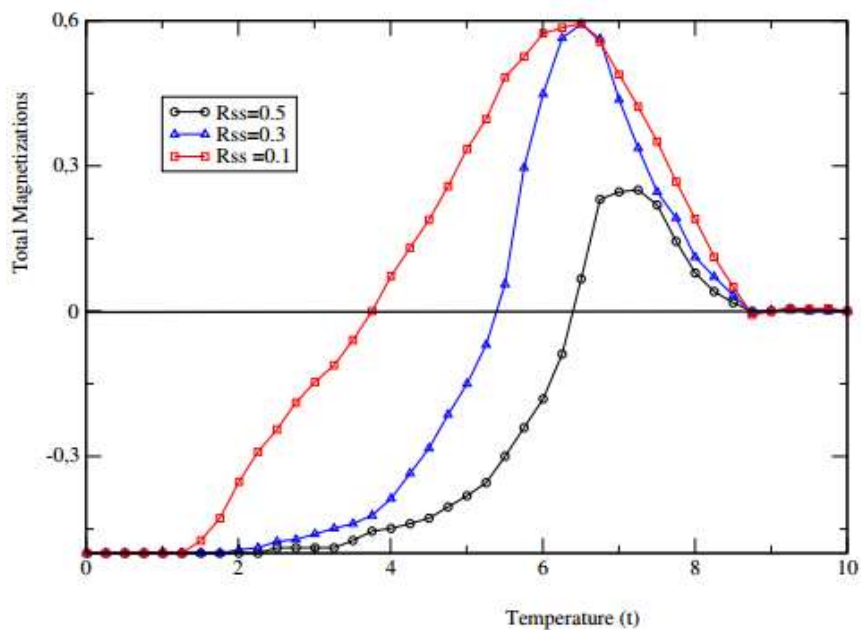


Figure II-4: Variation de l'aimantation totale du réseau en nid d'abeille en fonction de la température et du paramètre de couplage R_{SS} pour : $R_{S\sigma} = -0,3$, $p=1$, $h=0$ et $\delta = 0$.

Dans ce qui suit, nous étudions l'effet du couplage d'échange réduit $R_{S\sigma}$ (entre les spins S et σ) sur l'aimantation totale dans le cas pur. Pour la valeur fixe $R_{SS} = 0,3$, et en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe, la figure II-5 montre la diminution de la température de compensation lors de l'augmentation des valeurs de $R_{S\sigma} = -0,4$ jusqu'à $R_{S\sigma} = -0,1$. En revanche, la courbe correspondant à $R_{S\sigma} = -0,5$ ne montre aucune température de compensation, car l'interaction ferrimagnétique entre les spins du sous-réseau S - σ devient plus forte. Ces résultats sont cohérents avec ceux déjà obtenus par Cardona et al. [24]. De plus, nous constatons également que la valeur du paramètre réduit $R_{S\sigma}$ n'a aucun effet sur la température de transition de la phase ferrimagnétique à la phase paramagnétique.

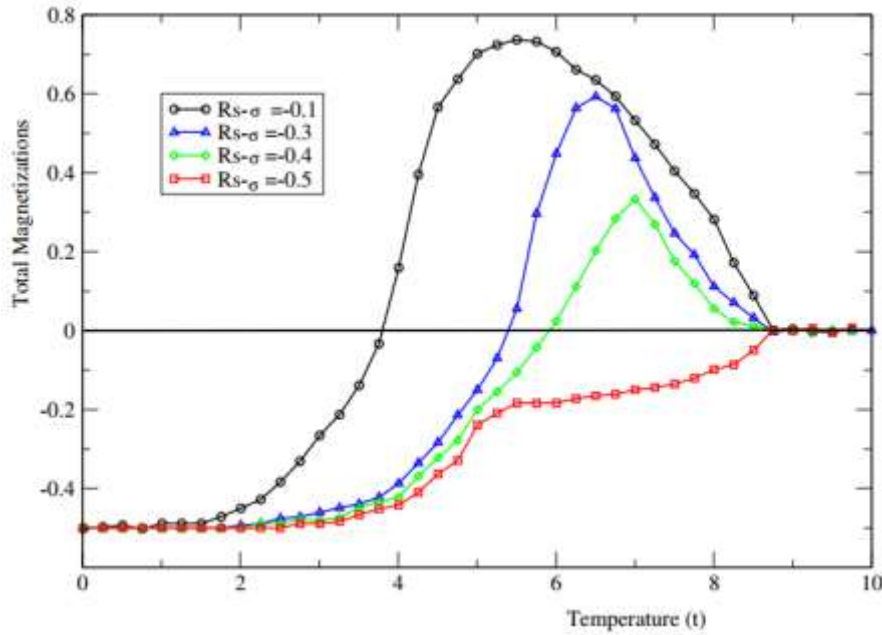


Figure II-5: Variation de l'aimantation totale du réseau en nid d'abeille en fonction de la température et du paramètre de couplage $R_{S\sigma}$ pour $R_{SS}=0.3$, $p=1$, $h=0$ et $\delta=0$.

II.3.2.3 Effet de la dilution sur l'aimantation totale

Puisqu'il n'y a vraiment pas de composé parfait dans la nature, nous nous intéressons à l'effet de la dilution de spin sur les propriétés magnétiques de ce système. En effet, nous diluons au hasard uniquement les atomes S afin d'inspecter l'effet de la concentration de dilution sur le comportement de l'aimantation totale. Pour cela, la figure II-6 illustre l'effet de la dilution sur l'aimantation totale pour les valeurs fixes $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $h = 0$ et $\delta = 0$. Nous constatons que la température de compensation augmente lorsque la concentration de dilution p diminue de 1 à 0,7. Nous rappelons que $p = 1$ correspond au cas pur, tandis que $p = 0,7$ signifie que la dilution est de 30%. En effet, l'augmentation de la température de compensation lors de l'augmentation de la dilution (diminution de p) est due à la compétition entre les spins S et σ orientés en sens opposés. En effet, le nombre d'atomes S diminue dans le système lors de la diminution de la concentration de dilution (augmentation de la dilution). Nous remarquons également que la température de transition des phases ferrimagnétique aux phases paramagnétiques ne subit pas de variation détectable dans le cas de la dilution.

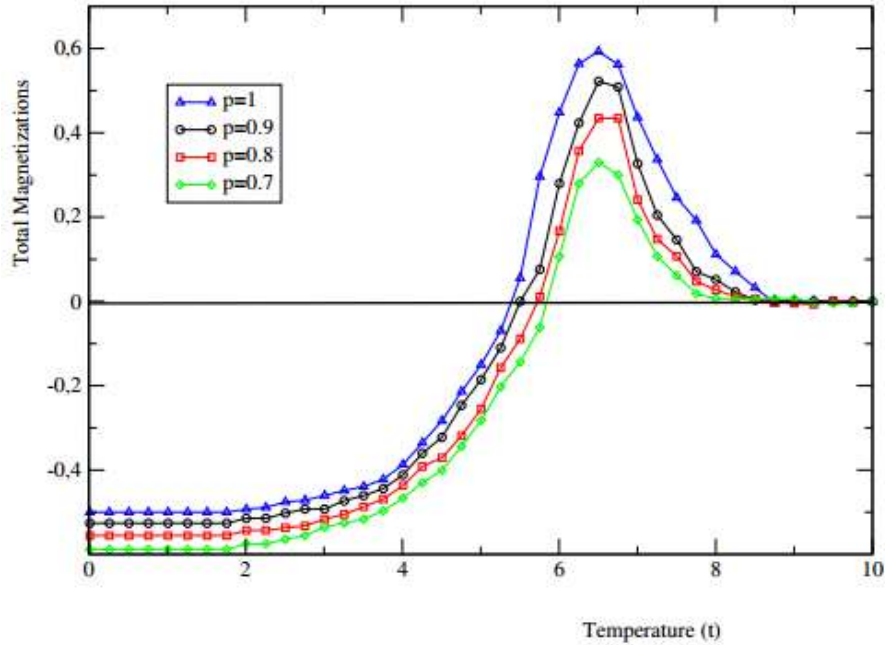


Figure II-6: Effet de la dilution sur l'aimantation totale pour des valeurs fixes des paramètres : $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $h = 0$ et $\delta = 0$.

II.3.2.4 Aimantation totale en fonction du champ cristallin en présence de la dilution

Afin de déterminer le comportement de l'aimantation totale vis-à-vis de la variation du champ cristallin nous avons donné les résultats obtenus sur la figure II-7. Dans cette figure nous présentons la variation de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit δ pour des valeurs sélectionnées de la concentration de dilution, dans le cas où $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $t = 0,5$ et $h = 0$. Nous constatons qu'il n'y a pas d'aimantation lors de la variation de la concentration de dilution p jusqu'à $\delta = -2$ (région 1). Le système est dans sa phase paramagnétique. Alors que pour $-2 < \delta < -1,2$ (région 2), l'aimantation totale atteint presque une valeur constante. De plus, pour $\delta > -1,2$ (région 3), l'aimantation totale diminue brutalement jusqu'à atteindre une valeur constante, passant par la valeur nulle de l'aimantation pour $\delta = \delta_{comp}$. Une telle valeur de champ cristallin (δ_{comp}), correspondant à la phase ferrimagnétique, diminue lorsque nous augmentons la dilution.

En résumé, la valeur absolue de l'aimantation totale augmente lors de la diminution de la concentration de dilution dans les régions 2 et 3, car le système étudié est dans son état ferrimagnétique.

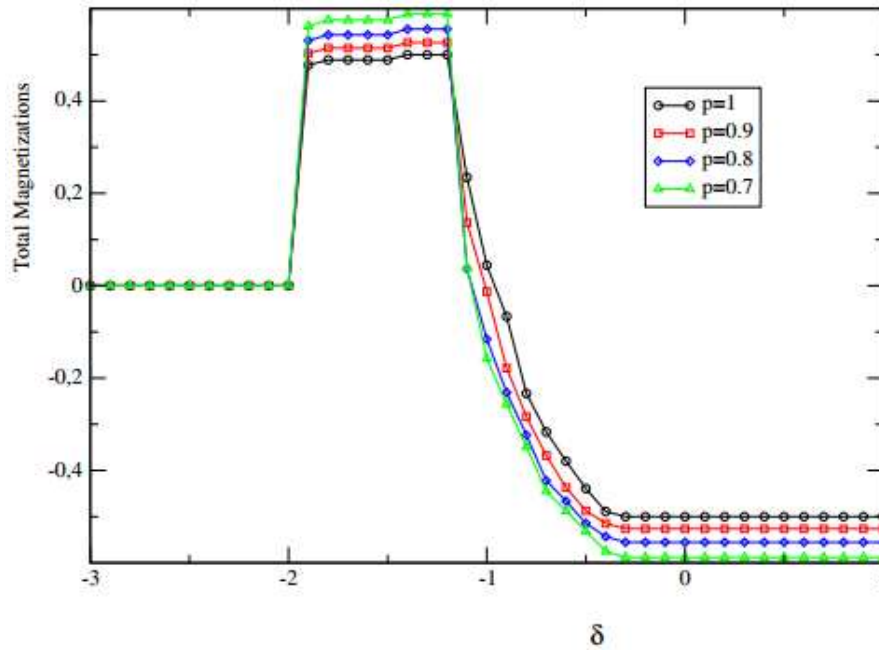


Figure II-7: Aimantation totale en fonction du champ cristallin pour une probabilité d'occupation p et pour des valeurs sélectionnées des paramètres : $R_{S\sigma}=-0.3$, $R_{SS}=0.3$, $h=0$ et $t=0.5$.

II.3.2.5 Cycles d'hystérésis pour le réseau en nid d'abeilles

Enfin, pour étudier l'effet de la dilution dans ce système sur les cycles magnétiques, nous rapportons sur la figure II-8 les résultats obtenus pour $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$ et $t = 0.5$. Cette figure montre que les cycles d'hystérésis magnétiques présentent trois boucles, ceci est essentiellement due à l'existence de deux configurations intermédiaires stables. En accord avec les résultats obtenus sur la figure II-7, la figure II-8 montre que l'aimantation rémanente augmente dans sa valeur absolue lors de l'augmentation de la concentration de dilution (p diminue de 1 à 0.7) car les spins S et σ sont dans leurs directions opposées (phase ferrimagnétique).

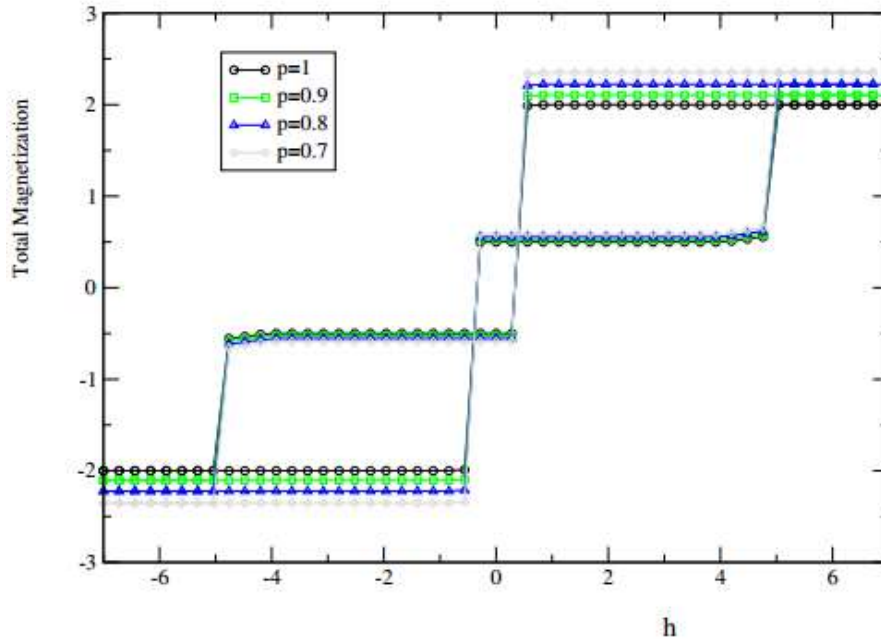


Figure II-8: Cycle d'hystérésis magnétique dans le réseau en nid d'abeilles en fonction de la probabilité de dilution pour : $R_{S\sigma} = -0.3$, $R_{SS} = 0.3$, $\delta = 0$ et $t = 0.5$.

II.4 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à l'étude des diagrammes de phases et des propriétés magnétiques au sein d'un nanoréseau en nid d'abeille. Parmi les 24 configurations stables possibles, 16 sont présentes dans le plan (h, δ) tandis que seulement 6 configurations stables existent dans le plan $(R_{SS}, R_{S\sigma})$. Le système étudié par la méthode de simulation de Monte Carlo présente une température de compensation qui apparaît pour des valeurs spécifiques des paramètres de couplage d'échange et qui est fortement affectée par la concentration de dilution. Les cycles d'hystérésis sont moins influencés.

**CHAPITRE III: PROPRIETES MAGNETIQUES D'UNE
STRUCTURE BICOUCHES DE BOROPHENE A SPINS
MIXTES**

III.1 Introduction

Les spins mixtes dans le modèle d'Ising est un sujet intéressant dans l'étude des nanomatériaux [104–107], en particulier le binaire (1, 3/2) [108–110]. Deviren et al [111] ont étudié les propriétés magnétiques des spins mixtes (1,3/2) dans une structure Core-shell. Ils ont rapporté certains phénomènes caractéristiques dépendant du rapport entre les paramètres physiques de la surface de l'enveloppe et du noyau.

Nous étudions dans le présent chapitre une structure de borophène avec des spins mixtes. Cette structure pourrait avoir plusieurs applications en spintronique [112]. Rappelons que le borophène est une structure bidimensionnelle du bore. Il est composé de 36 atomes avec un noyau hexagonal au milieu de cette unité. Des chercheurs prévoient que le borophène peut être entièrement métallique [113]. Plusieurs études ont été développées pour étudier le borophène de manière expérimentale et théorique. Dans le domaine de la chimie, plusieurs travaux ont été réalisés pour révéler toutes les caractéristiques du borophène. En utilisant des simulations de dynamique moléculaire ab-initio, Jiang et al [114] ont étudié une nouvelle application du borophène comme matériau anodique pour les batteries lithium-ion. Ils ont conclu que le borophène a un bon potentiel en termes de densité d'énergie et de puissance.

Dernièrement, des études ont conduit à la synthèse du borophène par la monocouche de bore [115–117]. Afin d'étudier les propriétés du borophène, Bhuvaneswari et al [118] ont exploré les propriétés électroniques du nanotube de borophène, ils ont en particulier examiné les propriétés d'adsorption des molécules de l'amine Diméthyl et de l'amine Triméthyl sur le nanotube de borophène en utilisant la fonction de Green hors équilibre et la méthode DFT. Dans un travail similaire, Zhang et al [113] ont conclu que les propriétés mécaniques du borophène ont une importance particulière, puisqu'il est léger et qu'il a une densité de masse faible que les autres matériaux 2D. Ces auteurs ont examiné la possibilité d'utiliser le borophène comme élément de renforcement pour la conception des panneaux composites. Ils ont suggéré que le borophène métallique peut également être utilisé pour fabriquer des électrodes flexibles car il présente des niveaux de flexibilité élevés.

Le système étudié dans ce chapitre est composé de deux couches étendues de structure borophène avec des spins mixtes. Nous présentons d'abord les diagrammes de phases de l'état fondamental du système. Nous discutons ensuite le comportement thermique de l'aimantation totale en fonction des valeurs des interactions de couplage d'échange. Dans la littérature, nous

n'avons relevé aucune étude des propriétés magnétiques sur une structure de borophène bicouches avec des spins mixtes.

III.2 Théorie et modèle

La structure du borophène étudiée est formée de deux types d'atomes, avec des spins mixtes ferrimagnétiques (1, 3/2), disposés ensemble dans une structure bicouches comme le montre la figure III-1. La couche 1 est formée de 126 atomes avec des spins $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ et 84 atomes avec des spins $S = \pm 1, 0$. Alors que la couche 2 contient 126 atomes avec $S = \pm 1, 0$ et 84 atomes avec des spins $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$. Le nombre total de spins dans le système est $N_{\text{tot}} = 420$.

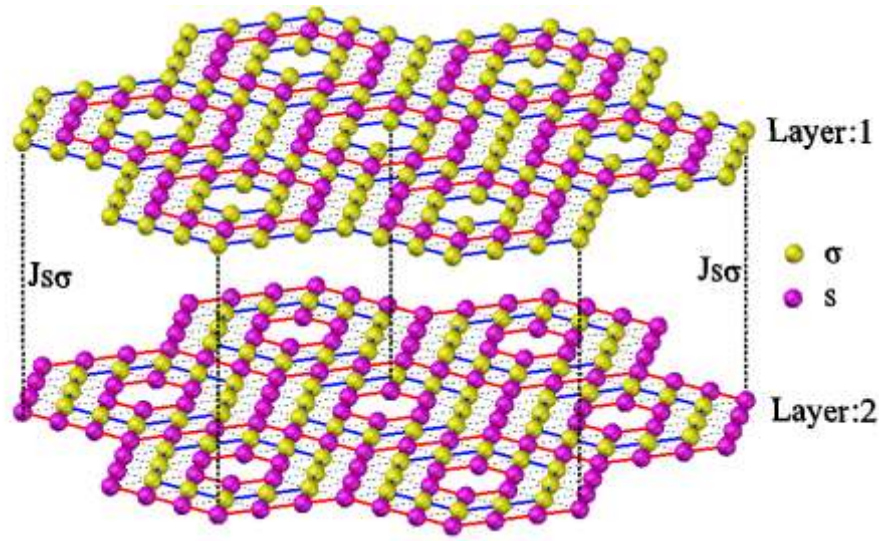


Figure III-1: Représentation de la structure bicouches du borophène à spins mixtes.

L'Hamiltonien du système, qui comprend les interactions des sites les plus proches voisins dans chaque couche, les interactions entre la couche 1 et la couche 2, le champ cristallin et le champ magnétique externe, est donné comme suit :

$$\mathcal{H} = -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} \sigma_k \sigma_l - J_{S\sigma} \sum_{\langle m,n \rangle} S_m \sigma_n \quad (\text{III.1})$$

$$- \Delta_S \sum_i (S_i)^2 - \Delta_\sigma \sum_j (\sigma_j)^2 - H \left(\sum_i S_i + \sum_j \sigma_j \right)$$

où les notations $\langle i,j \rangle$, $\langle k,l \rangle$ et $\langle m,n \rangle$ désignent les premiers sites voisins occupés par les différents spins. J_{SS} et $J_{\sigma\sigma}$ sont les constantes d'interaction de couplage d'échange entre les deux premiers sites voisins les plus proches (S-S) et (σ - σ), respectivement dans chaque couche.

$J_{S\sigma}$ est à la fois le paramètre de couplage d'échange des deux premiers spins du plus proche voisin (S- σ) entre la couche 1 et la couche 2. H représente le champ magnétique externe. Δ_S et Δ_σ représentent les champs cristallins agissant sur les moments de rotation S et σ respectivement. Nous prenons $\Delta = \Delta_S = \Delta_\sigma$. Afin de simplifier les notations, nous utilisons aussi les paramètres réduits suivants : $R_1 = J_{SS}/J_{\sigma\sigma}$, $R_2 = J_{S\sigma}/J_{\sigma\sigma}$, $h = H/J_{\sigma\sigma}$, $t = T/J_{\sigma\sigma}$ et $\delta = \Delta/J_{\sigma\sigma}$.

Les formules que nous avons utilisées dans ce chapitre, pour le calcul de l'aimantation, de la susceptibilité magnétique et de la chaleur spécifique de la structure de borophène ont été placées dans l'annexe 2.

III.3 Résultats et discussion

III.3.1 Diagramme de phases de l'état fondamental

Dans cette section, nous étudions les diagrammes de phases de l'état fondamental de la structure bicouches du borophène avec des spins mixtes $S = \pm 1, 0$ et $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$, comme cela a déjà été expliqué ci-dessus. Nous nous sommes basés sur l'Hamiltonien donné dans l'équation (III.1) pour tracer toutes les figures qui correspondent à plusieurs plans des paramètres physiques comme indiqué dans la figure III-2. Nous en déduisons $3 \times 4 = 12$ configurations stables possibles.

Nous traçons sur la figure III-2(a) les diagrammes de phases de l'état fondamental dans le plan (δ, h) , pour les valeurs fixes des paramètres réduits $R_1 = 1$ et $R_2 = -1$. Cette figure ne montre que dix configurations stables, à savoir $(+3/2, +1)$; $(+3/2, 0)$; $(+3/2, -1)$; $(+1/2, +1)$ et $(+1/2, 0)$ pour h positif. $(-1/2, 0)$; $(-3/2, +1)$; $(-1/2, -1)$; $(-3/2, 0)$ et $(-3/2, -1)$ pour h négatif. Elle présente une symétrie parfaite par rapport à l'axe $h=0$.

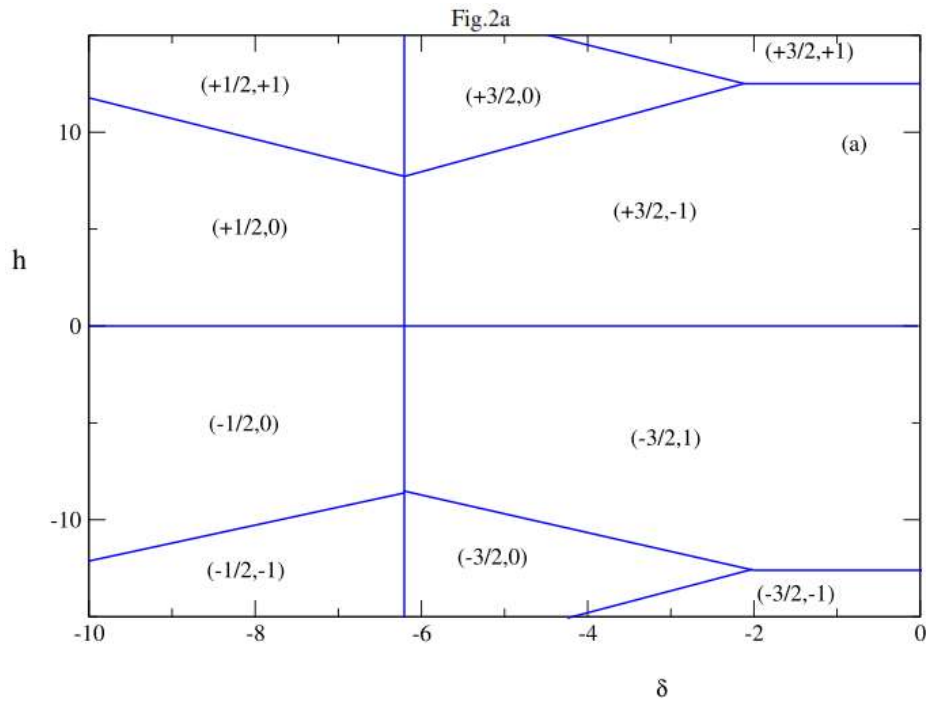
La figure III-2(b) illustre les diagrammes de phases de l'état fondamental dans le plan (R_1, R_2) , pour $h=0$ et $\delta=0$. Dans ce plan, il n'y a que six configurations stables : $(-3/2, -1)$; $(+3/2, +1)$; $(-1/2, 0)$; $(+1/2, 0)$; $(-3/2, +1)$ et $(+3/2, -1)$.

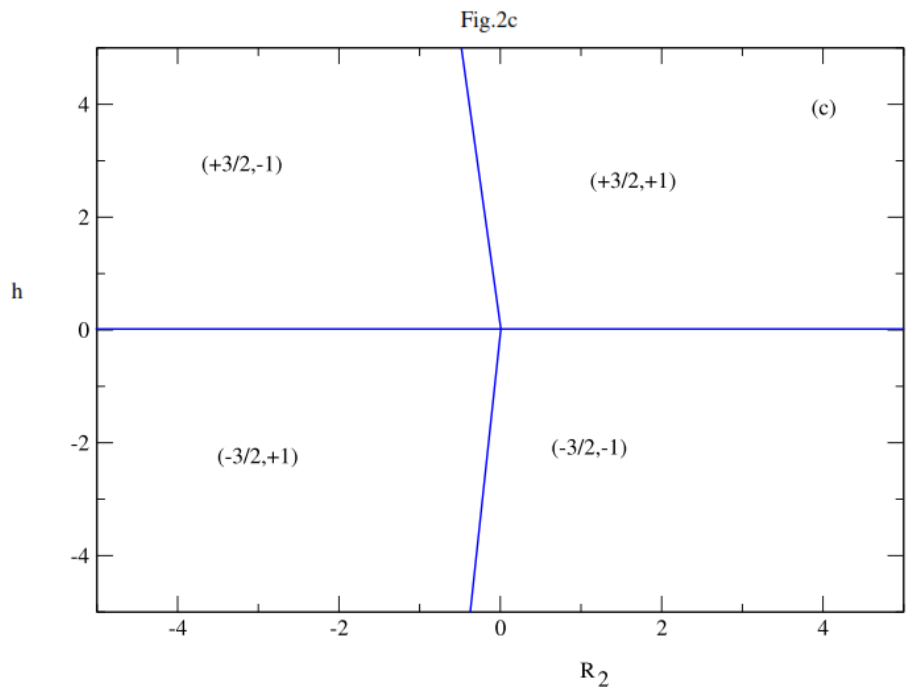
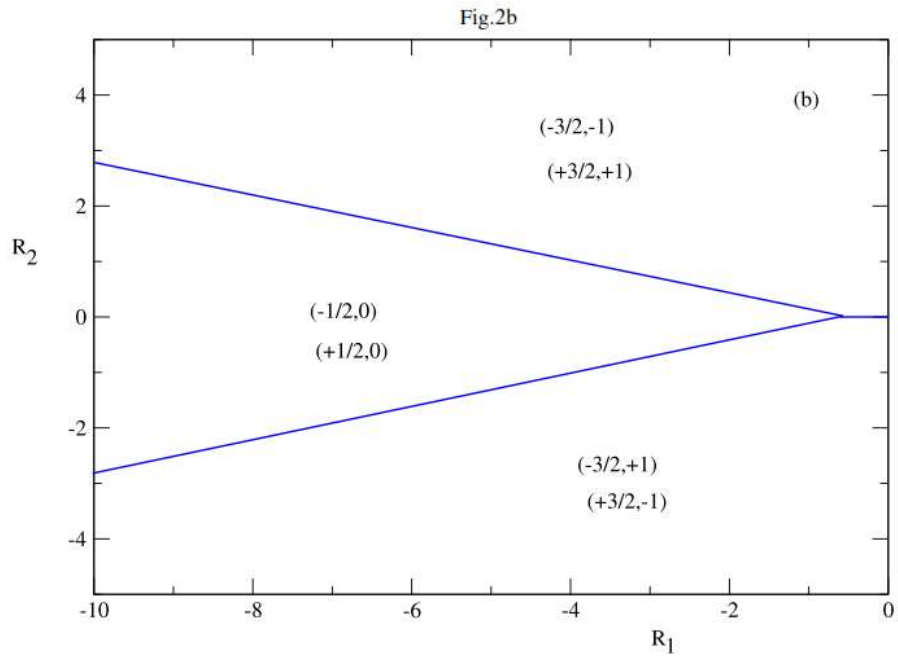
Dans la figure III-2 (c), nous avons considéré le plan (R_2, h) , en l'absence du champ magnétique externe. Dans ce plan, il n'y a que quatre configurations stables : $(+3/2, +1)$; $(+3/2, -1)$; $(-3/2, +1)$ et $(-3/2, -1)$. Nous pouvons remarquer que les quatre phases magnétiques ont un point commun d'intersection ($R_2 = 0, h = 0$).

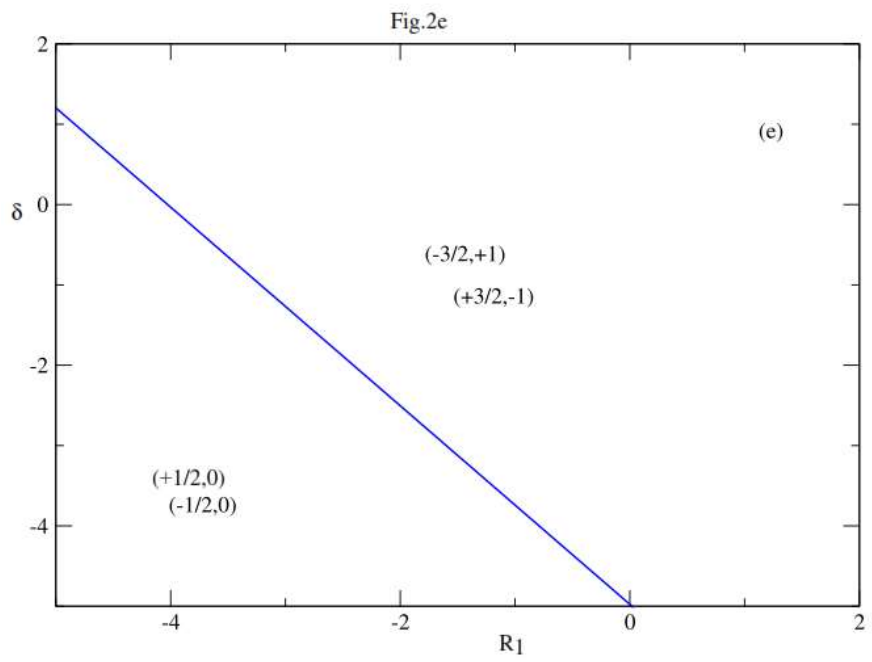
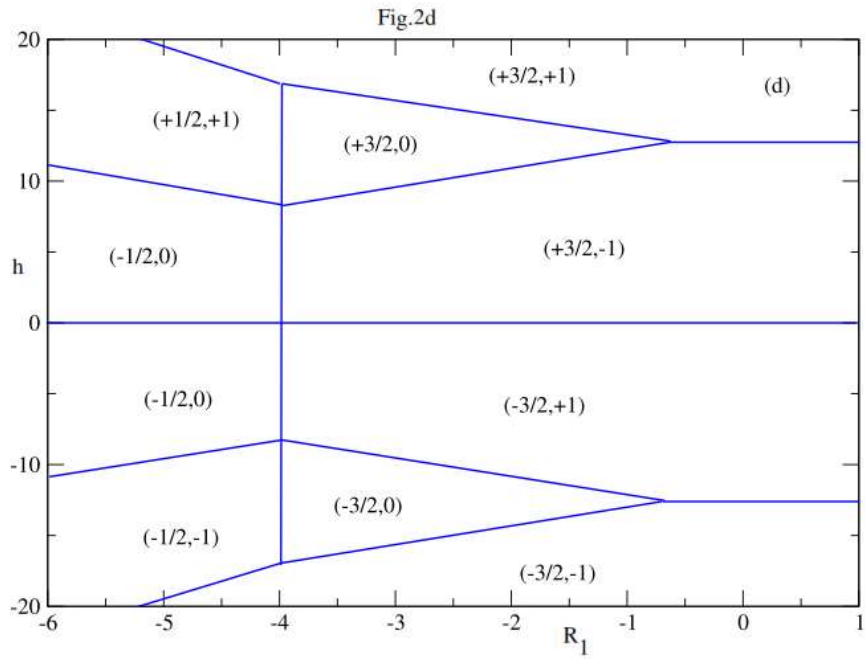
La figure III-2(d) correspondant au plan (R_1, h) , en l'absence du champ cristallin et pour $R_2 = -1$, montre les mêmes configurations stables que celles obtenues dans le plan (δ, h) .

Dans la figure III-2(e), nous considérons le plan (R_1, δ) , en l'absence du champ magnétique externe, pour le paramètre de couplage d'échange fixe $R_2 = -1$. Dans cette figure, nous n'avons que quatre configurations stables : $(-3/2, +1)$; $(+3/2, -1)$; $(-1/2, 0)$ et $(+1/2, 0)$.

Enfin, nous présentons sur la figure III-2(f), les diagrammes de phases dans le plan (R_2, δ) . A partir de cette figure, nous obtenons les mêmes configurations stables que celles déjà trouvées dans la figure III-2(b). Nous remarquons que le champ de cristallin a un effet important sur l'ordre du diagramme. Un comportement similaire a été obtenu par Deviren [54].







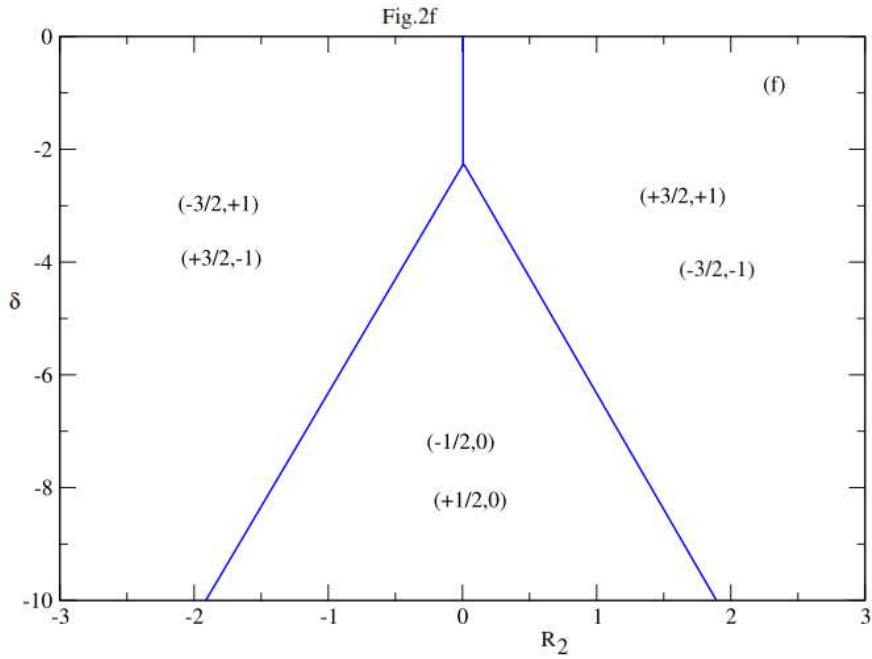


Figure III-2: Diagrammes de phases à l'état fondamental de la structure bicouches du borophène à spins mixtes (1, 3/2). (a): Dans le plan (δ , h) avec $R_1=1$ et $R_2=-1$. (b): Dans le plan (R_1 , R_2) avec $h=0$ et $\delta =0$. (c): Dans le plan (R_2 , h) avec $h=0$ et $R_1=1$. (d): Dans le plan (R_1 , h) avec $R_2=-1$ et $\delta =0$. (e): Dans le plan (R_1 , δ) avec $h=0$ et $R_2=-1$. (f): Dans le plan (R_2 , δ) avec $h=0$ et $R_1=1$.

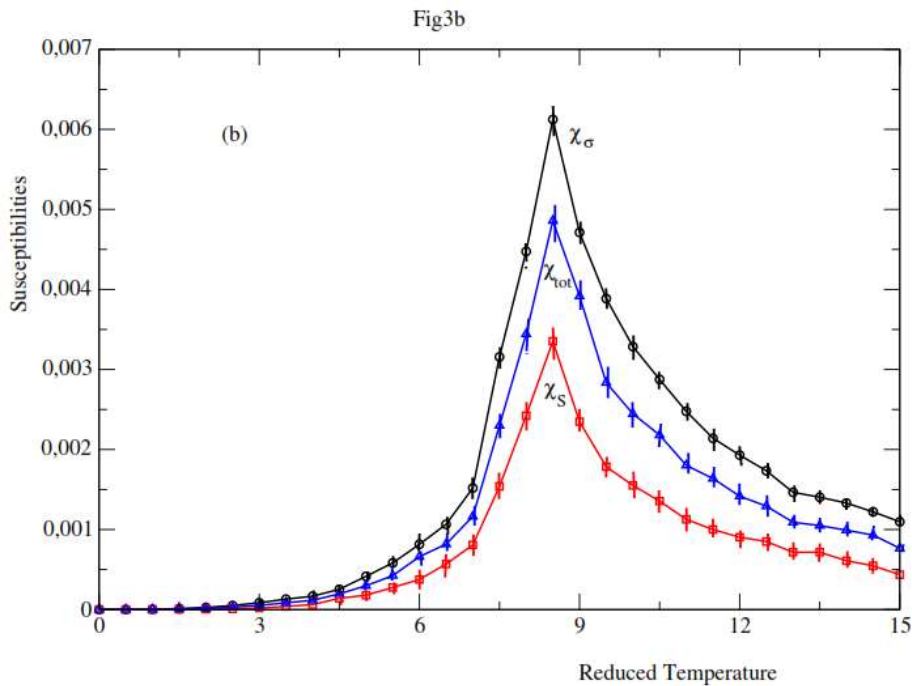
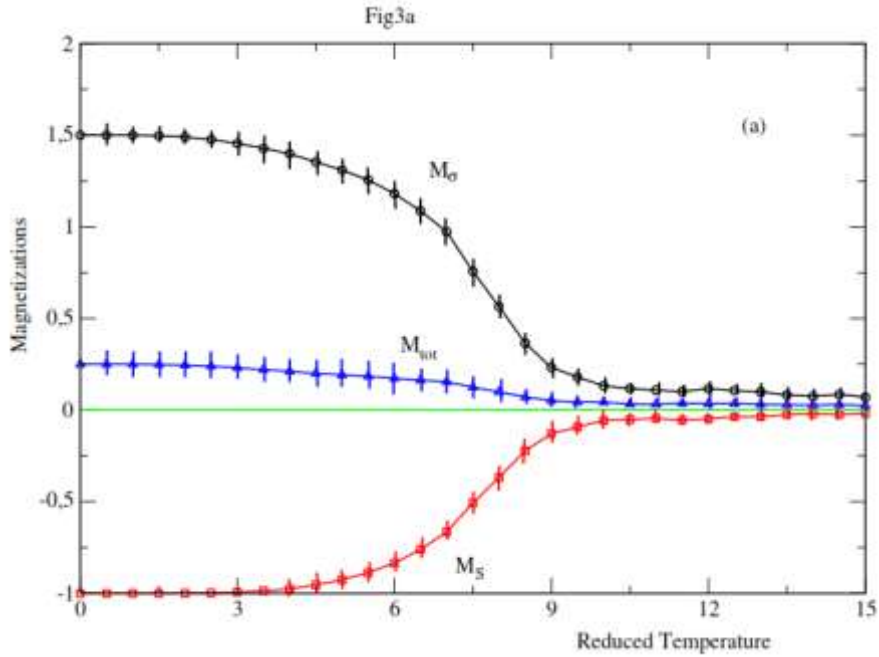
III.3.2 Résultats de la simulation par la méthode de Monte Carlo

Dans cette partie, pour étudier les propriétés magnétiques du système nous utilisons l'Hamiltonien décrit dans l'équation (III.1), et les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis. Pour tracer nos courbes, les barres d'erreur sont calculées avec la méthode du Jackknife [85].

III.3.2.1 Comportement des aimantations et des susceptibilités en fonction de la température

La figure III-3(a) illustre le comportement thermique des aimantations partielles et totales du système étudié, pour des valeurs des paramètres réduites fixes : $R_2 = -1$, $R_1 = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$. Cette figure montre que, à très basse température, les aimantations partielles sont en bon accord avec les valeurs des diagrammes de phase de l'état fondamental ($\sigma = +3/2$ et $S = -1$) présentées dans la section précédente. La courbe d'aimantation totale présente une valeur de saturation pour $M_{\text{tot}} = [(3/2-1)/2] = 0.25$. De plus, la variation thermique des susceptibilités totale et partielles est présentée sur la figure III-3(b). Nous remarquons que les trois pics observés dans cette figure sont tous situés à la même valeur de température critique qui est égale à 8.5. La figure III-3(c) présente la variation thermique de chaleurs spécifiques totale et partielles de la

structure bicouches du borophène. Comme le montre clairement cette figure, le comportement de la chaleur spécifique est presque similaire au comportement de la susceptibilité de la figure III-3(b). En effet, la chaleur spécifique du système augmente avec la température jusqu'au point maximum correspondant à la température de transition ($T_c \approx 8.0$) puis diminue jusqu'à une valeur proche de zéro.



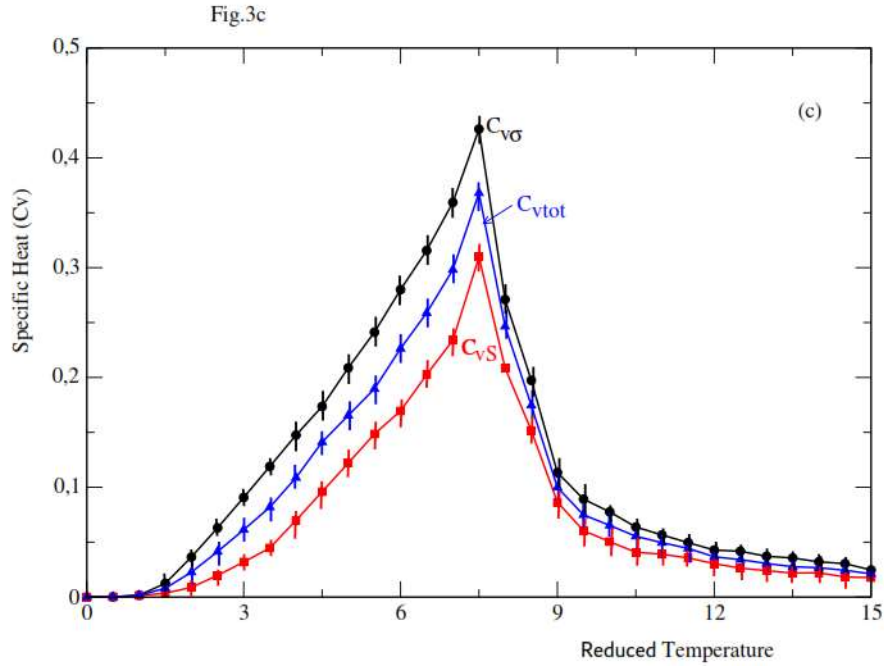


Figure III-3: (a) Aimantations (b) susceptibilités et (c) chaleur spécifique, en fonction de la température pour $R_2 = -1$, $R_1 = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$.

III.3.2.2 Effets du paramètre de couplage ferrimagnétique

Afin de montrer l'effet de l'interaction de couplage d'échange ferrimagnétique R_2 sur l'aimantation totale et la susceptibilité magnétique totale, nous rapportons dans les figure III-4(a) et la figure III-4(b) les résultats obtenus. Ces figures ont été établies pour une valeur sélectionnée du paramètre réduit $R_1 = 1$, en l'absence du champ cristallin réduits et du champ magnétique externe. Sur la figure III-4(b), nous constatons que pour des températures basses ($t < 2$), la valeur de saturation ($M_{tot} = 0,25$) de l'aimantation totale n'est pas affectée lorsque l'on fait varier le paramètre R_2 . Alors que pour $t > 2$, l'aimantation totale diminue. Cette décroissance est encore plus importante lorsque R_2 est faible en valeur absolue, ce qui entraîne une bonne séparation des courbes. Cela est dû au fait que lorsque nous augmentons $|R_2|$, l'interaction entre les spins S - σ devient forte. Un tel comportement est déjà observé par Yang et al [119]. Pour des températures réduites élevées ($t > 12$), toutes les aimantations saturent car le système tend vers son état paramagnétique. En outre, la figure III-4(b) confirme que la valeur de saturation de la susceptibilité magnétique totale dépend largement de la variation du paramètre R_2 . En effet, le pic de la susceptibilité magnétique totale correspondant à la valeur de la température critique, tend vers les températures les plus élevées en augmentant la valeur de l'interaction de couplage d'échange réduit $|R_2|$.

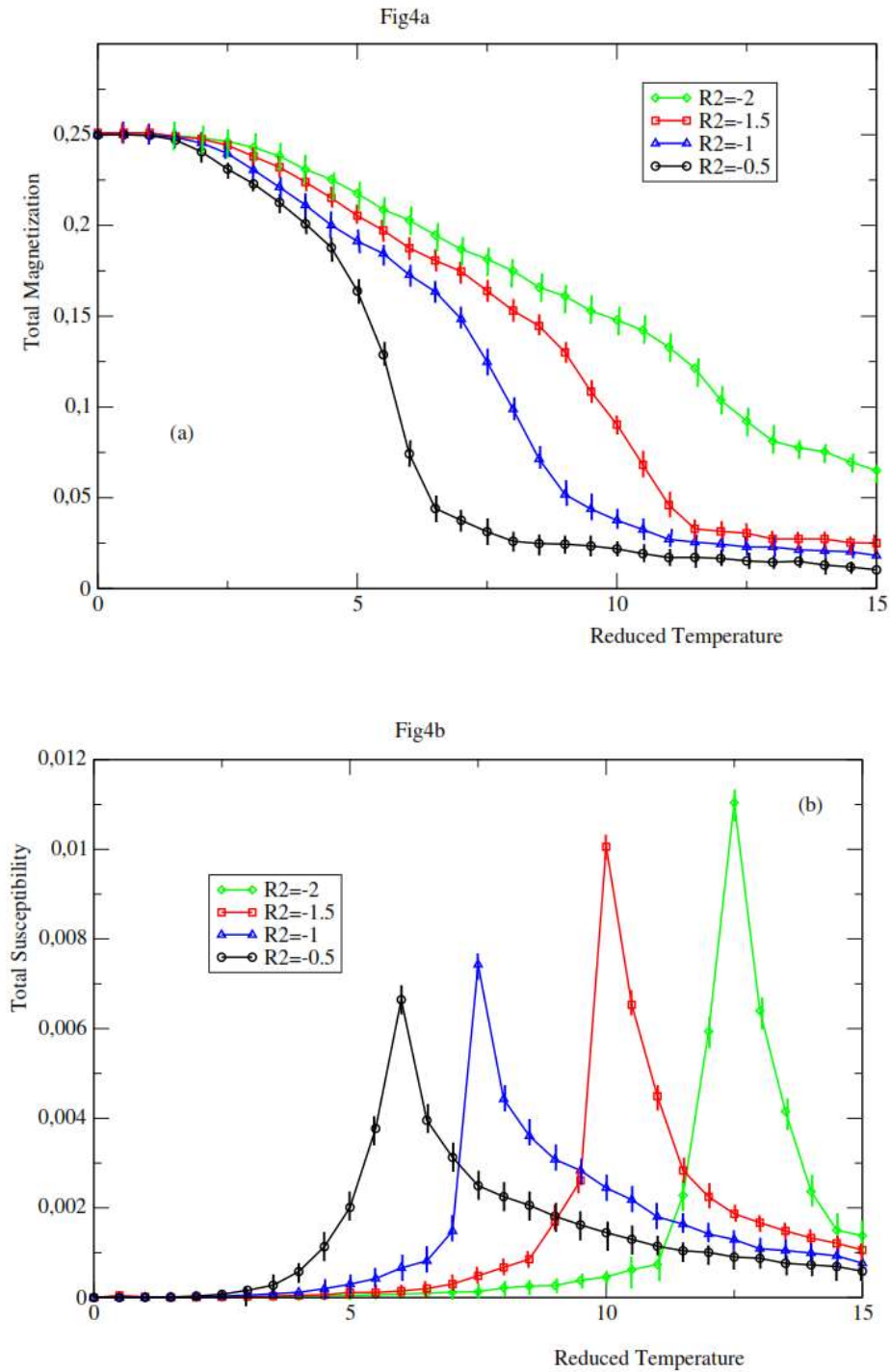


Figure III-4: Effet du paramètre de couplage d'échange R_2 pour : $R_1 = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$. (a): Aimantation totale en fonction de la température. (b): Susceptibilité magnétique totale en fonction de la température.

Sur la base des deux figures précédentes, nous traçons la figure III.5 pour mieux comprendre le comportement de la température critique en fonction du paramètre R_2 . Il est clair que la valeur de la température critique diminue lorsque l'interaction de couplage d'échange $|R_2|$ diminue.

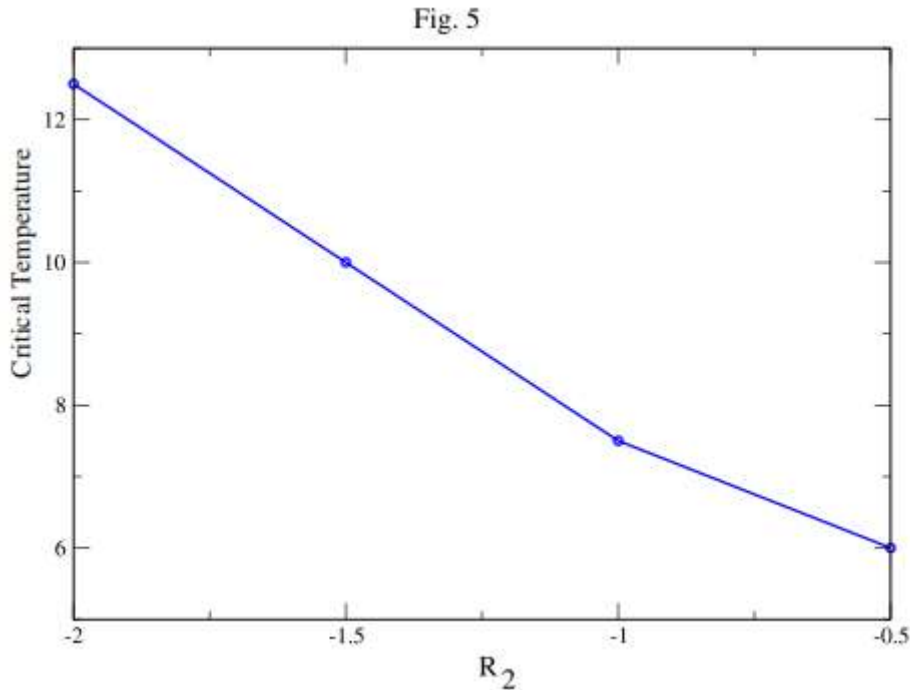


Figure III-5: Température critique en fonction du paramètre de couplage d'échange R_2 pour: $R_1 = 1$, $h = 0$ et $\delta = 0$.

III.3.2.3 Effet de l'interaction de couplage positive

L'effet de l'interaction de couplage réduite R_1 sur l'aimantation totale et la susceptibilité de la structure bicouches du borophène est présenté sur les figures III-6(a) et III-6(b), pour $R_2 = -1$, $h = 0$ et $\delta = 0$. La figure III-6(a) montre que la variation du paramètre R_1 n'affecte pas l'aimantation totale à basse température ($t < 1$). Un tel effet est observé précédemment dans la figure III-5(a) quand nous avons varié le paramètre R_2 . Dans la plage des températures de 1 à 12.5, l'aimantation totale diminue pour saturer à des températures élevées ($t > 12.5$). Cette diminution est encore plus importante lorsque le paramètre R_1 diminue, car les interactions entre les spins S deviennent faibles. En outre, la figure III-6(b) décrit la variation thermique de la susceptibilité magnétique totale pour différentes valeurs du paramètre R_1 . Le pic de la susceptibilité magnétique tend vers les températures élevées, lorsque le paramètre R_1 réduit augmente. En outre, la valeur maximale du pic augmente lorsque la valeur de R_1 augmente. De tels résultats peuvent être comparés à ceux obtenus dans la Réf. [120].

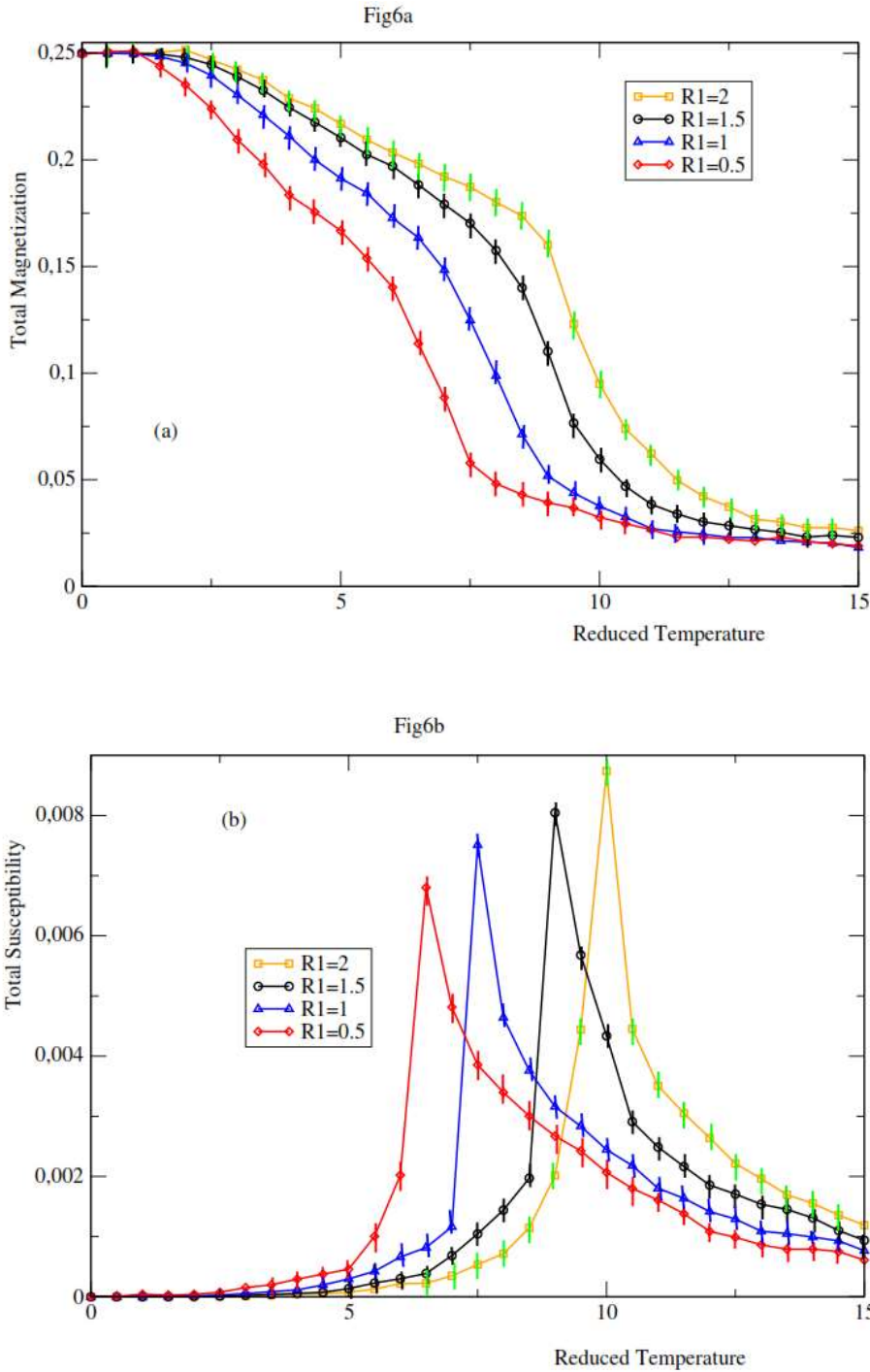


Figure III-6: Effet de l'interaction de couplage d'échange R_1 sur la variation thermique de : (a) l'aimantation totale et (b) la susceptibilité magnétique totale pour $R_2 = -1$, $h = 0$ et $\delta = 0$.

En rassemblant les résultats des figures III-6(a) et III-6(b), nous avons tracé dans la figure III-7, le comportement de la température critique en fonction du paramètre R_1 . Nous remarquons que la température critique augmente presque linéairement lorsque nous augmentons le paramètre de couplage d'échange R_1 . Un comportement similaire a été observé par Kaile et al [121].

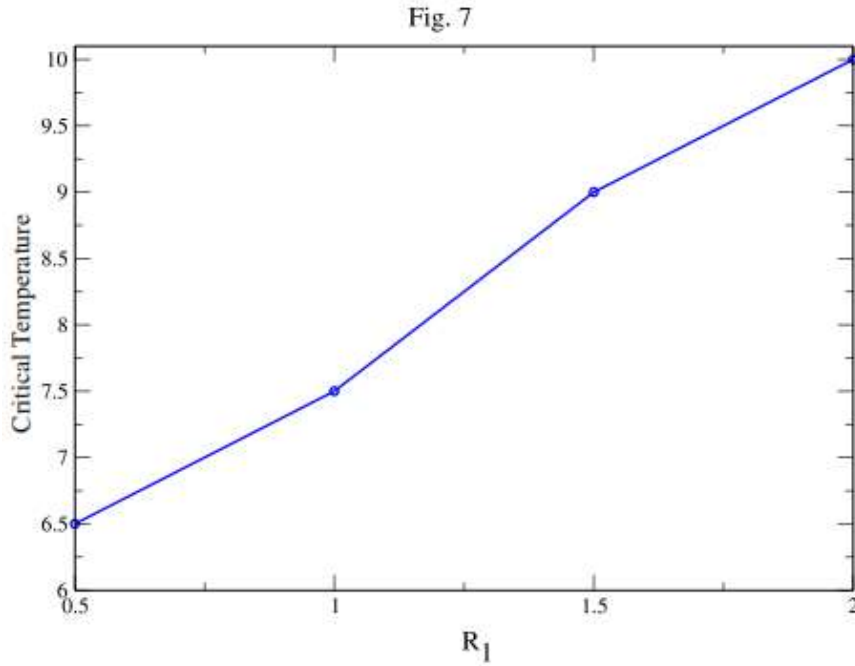


Figure III-7: Variation de la température critique en fonction du paramètre de couplage R_1 pour : $R_2 = -1$, $h = 0$ et $\delta = 0$.

III.3.2.4 Effet du champ magnétique externe

En relation avec les résultats précédents, nous illustrons dans les figures III-8(a) et III-8(b), l'effet du champ magnétique externe sur le système étudié. Pour les basses températures ($t < 2.5$), l'aimantation totale part de la valeur donnée précédemment ($M_{\text{tot}} = \frac{M_S + M_\sigma}{2} = 0.25$) où la variation du champ extérieur réduit n'a aucun effet, voir figure III-8(a). Cependant, pour les températures élevées ($t > 2.5$), l'aimantation totale augmente lorsque nous augmentons le paramètre réduit h , car la présence du champ magnétique tend à maintenir le système dans son état ferrimagnétique. En outre, nous constatons également que l'atténuation devient plus lente lorsque le champ magnétique externe réduit est plus important ($h = 1$ et 1.5). Par ailleurs, pour les grandes valeurs de h ($h > 1$), la figure III-8(b) montre le déplacement des pics de susceptibilité magnétique vers des valeurs de température plus élevées. Un résultat similaire est obtenu dans la Réf. [28].

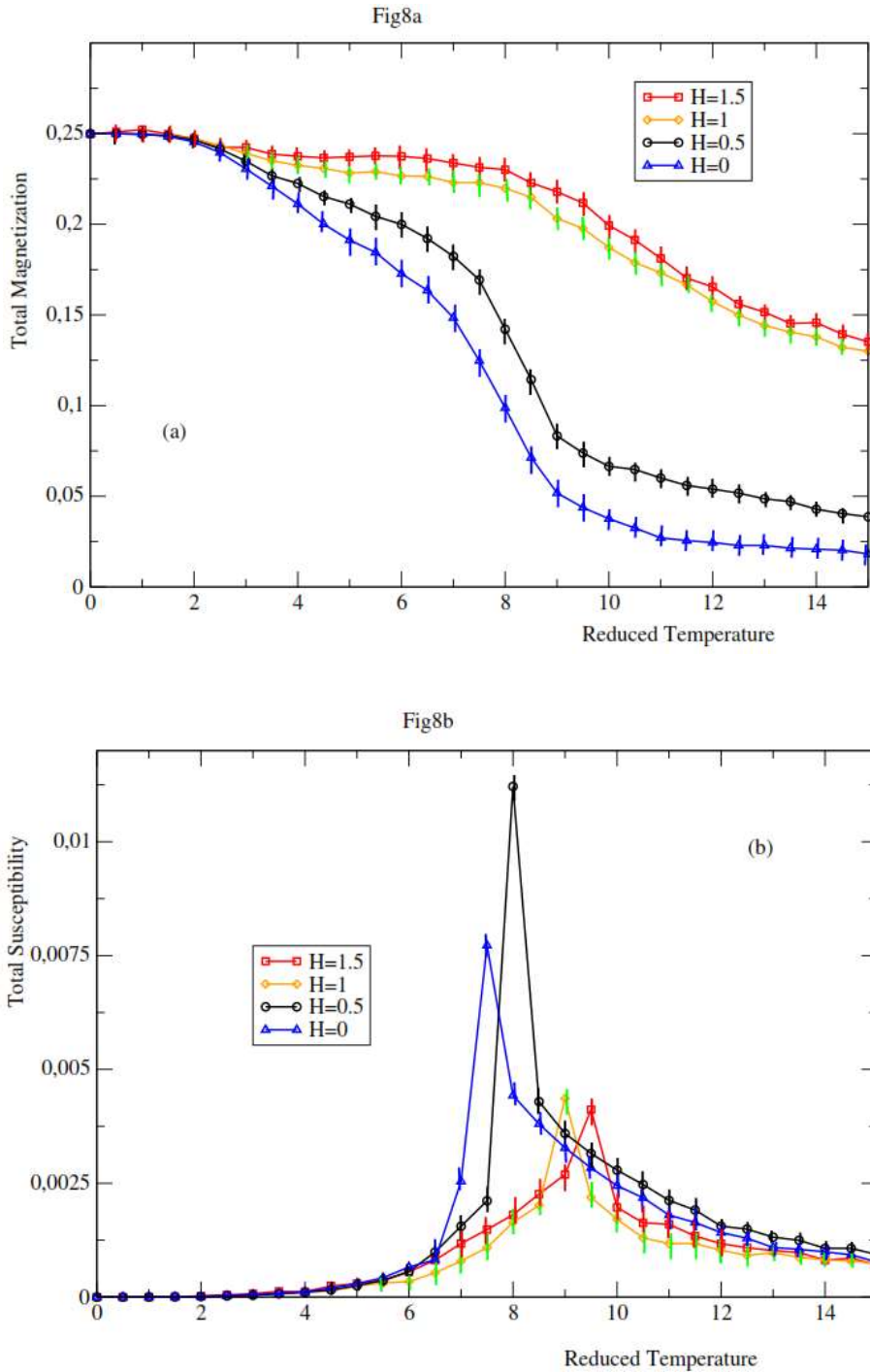
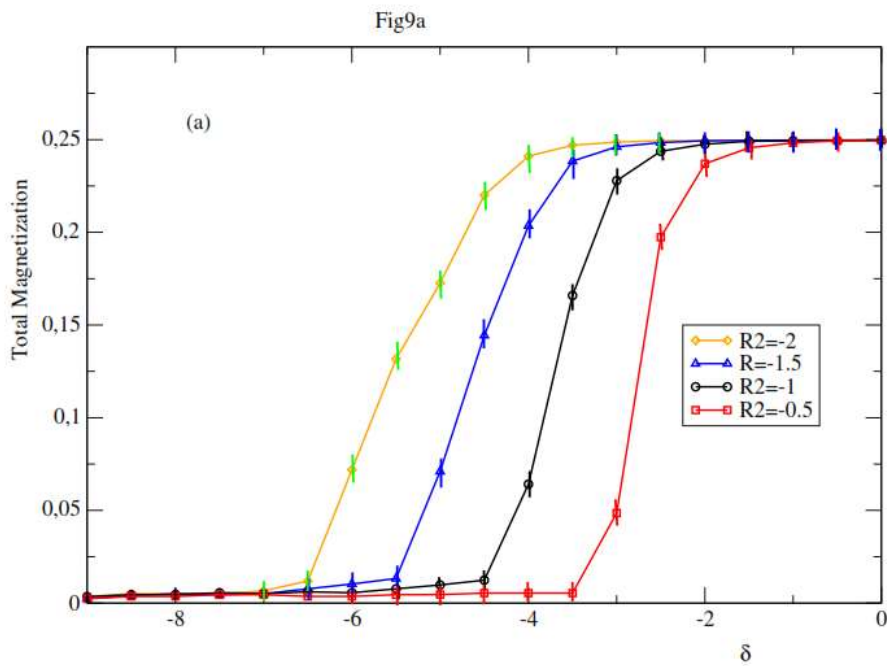


Figure III-8: Effet du champ magnétique externe sur les variations thermiques de : (a) Aimantation totale. (b) Susceptibilité magnétique totale, pour : $R_2 = -1$, $R_1 = 1$ et $\delta = 0$.

III.3.2.5 Variation de l'aimantation totale par rapport au champ cristallin

Pour compléter l'étude des propriétés magnétiques de notre système, nous étudions l'effet du champ cristallin réduit pour plusieurs valeurs des paramètres de couplage d'échange réduits : R_1 et R_2 , pour $t = 1$ et $h = 0$. En effet, la figure III-9(a) présente la variation de l'aimantation totale par rapport au champ cristallin réduit δ lorsque R_2 prend les valeurs : -0.5 , -1 , -1.5 et -2 .

Nous remarquons que l'effet du paramètre R_2 n'apparaît que pour les valeurs intermédiaires du champ cristallin réduit ($-6.5 < \delta < -1.5$). Nous notons que, quelle que soit la valeur de R_2 , le système reste dans sa phase ferrimagnétique pour $\delta > -1.5$ et reste dans son état paramagnétique pour $\delta < -6.5$. Il est clair que le champ cristallin critique correspondant à un type de transition du second ordre entre les deux phases augmente lorsque R_2 diminue. De toute évidence, comme le couplage d'échange $|R_2|$ est important, le système est maintenu dans sa phase ferrimagnétique. De plus, la figure III-9(b) illustre le comportement de l'aimantation totale lorsque le paramètre réduit R_1 prend les valeurs : 0.5, 1, 1.5 et 2. Des résultats similaires sont observés sur les figures III-9(a) et III-9(b) lorsque nous faisons varier $|R_2|$ ou R_1 .



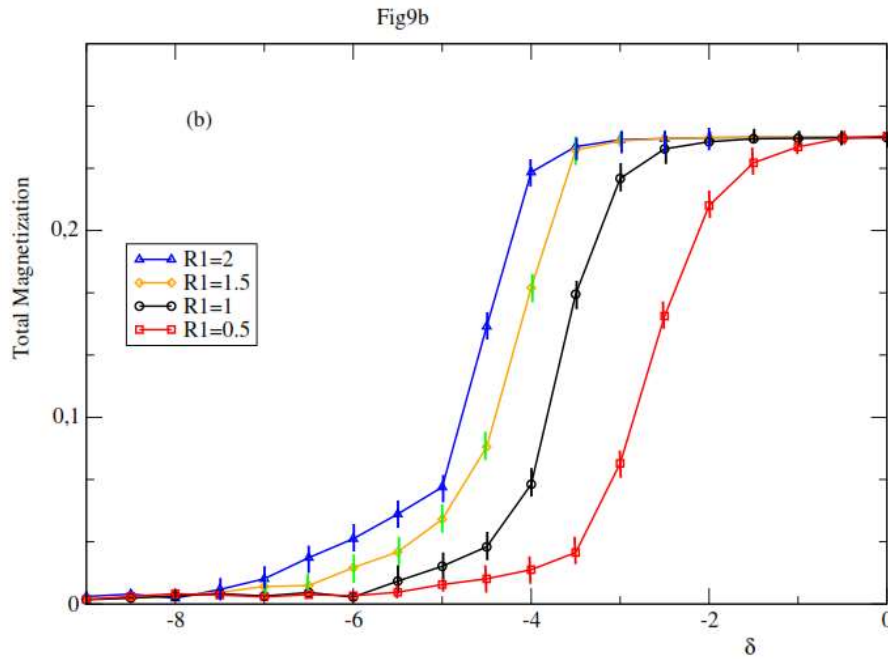


Figure III-9: Variation de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin pour : $t = 1$ et $h = 0$:

(a) en faisant varier le couplage d'échange ferrimagnétique R_2 pour : $R_1 = 1$ et

(b) en faisant varier le couplage d'échange R_1 pour $R_2 = -1$.

III.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les diagrammes de phases et les propriétés magnétiques de la structure bicouches du borophène en considérant les spins mixtes $(3/2, 1)$. Nous avons présenté et discuté les configurations stables dans différents plans de diagrammes de phases correspondant à l'état fondamental. Par ailleurs, les simulations par la méthode de Monte Carlo ont permis d'étudier la variation thermique de l'aimantation totale et de la susceptibilité magnétique totale en fonction des paramètres de couplage d'échange et du champ magnétique externe. Nous avons montré en particulier que l'augmentation des deux paramètres (R_1 et $|R_2|$) conduit à une augmentation presque linéaire de la température critique d'une part et à une diminution du champ cristallin d'autre part.

**CHAPITRE IV: PROPRIETES MAGNETIQUES D'UNE
STRUCTURE DE BOROPHENE BICOUCHES DILUEE**

IV.1 Introduction

Récemment, de nombreux chercheurs en physique de la matière condensée se sont intéressés à l'étude des propriétés des nanostructures expérimentalement [122–124] et théoriquement [125–129]. En effet, l'étude des propriétés magnétiques et thermodynamiques des nanostructures a fait l'objet de plusieurs recherches comme l'étude de structures à une couche [83,130], bicouches [57,131], trois- couches [132,133] et multicouches [134–137]. De plus, pour étudier plusieurs propriétés des nanostructures, la géométrie peut prendre une forme simple ou une forme core-shell [15,23,138]. Dans ce chapitre, nous investiguons l'effet de la dilution sur les propriétés magnétiques de la structure de borophène bicouches que nous avons traitée dans le troisième chapitre. Là encore, nous utilisons les simulations de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis, avec le modèle de Blume-Capel [12,139–141]. Le système étudié est composé de deux couches, et chaque couche contient 210 atomes avec des spins mixtes $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ et $S = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$. L'étude commence par l'analyse des configurations stables de l'état fondamental dans différents plans. La probabilité de dilution est appliquée une fois sur les atomes des spins σ , et une fois sur les atomes des spins S . Nous introduisons la dilution pour simuler la présence d'impuretés dans le système. Nous discutons les variations thermiques des aimantations totales et partielles et des susceptibilités magnétiques en fonction de la probabilité de dilution. Les cycles d'hystérésis seront établis.

IV.2 Théorie et modèle

Dans la présente étude, le système considéré est une structure de borophène bicouches, formée de deux types d'atomes à spins mixtes $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ et $S = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$. Ce système contient deux couches (L_1 et L_2) avec $210 \times 2 = 420$ atomes, et chaque plan est composé de deux types d'atomes. La couche L_1 comprend $N_{\sigma L1} = 126$ et $N_{SL1} = 84$, tandis que la couche L_2 est composée de $N_{\sigma L2} = 84$ et $N_{SL2} = 126$. La structure de borophène à deux couches est représentée sur la figure IV-1. Le nombre total de spins σ est alors $N_{\sigma} = N_{\sigma L1} + N_{\sigma L2} = 210$, et le nombre total de spins S est $N_S = N_{SL1} + N_{SL2} = 210$. La notation $N_{\sigma L1}$ (respectivement $N_{\sigma L2}$) désigne le nombre de spins σ dans la couche 1 (respectivement dans la couche 2), tandis que N_{SL1} (respectivement N_{SL2}) signifie le nombre de spins S dans la couche 1 (respectivement dans la couche 2).

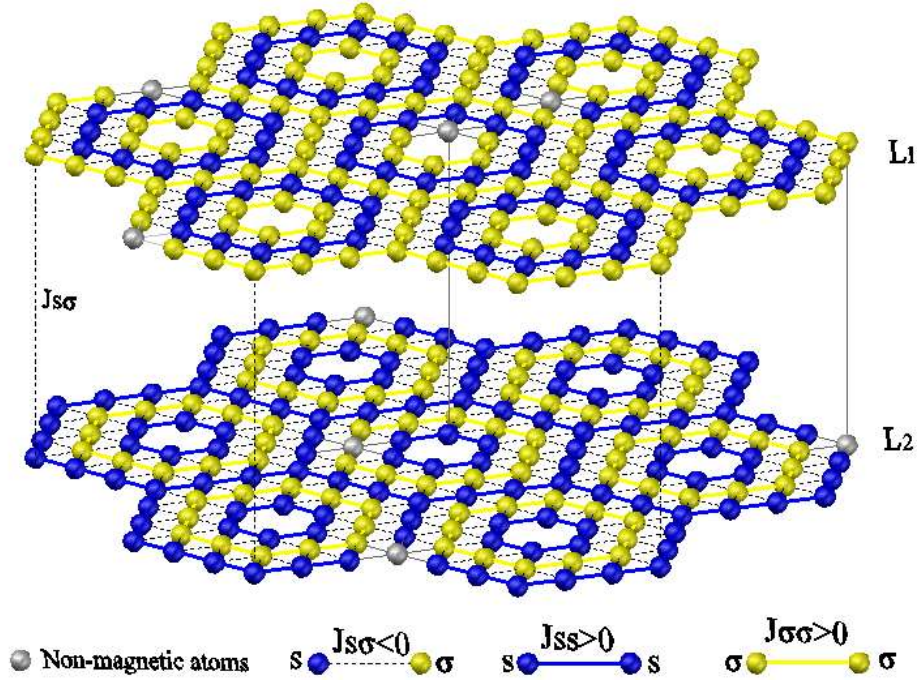


Figure IV-1: Représentation d'une structure de borophène à deux couches en présence des sites de dilution

L'hamiltonien de la structure de borophène à deux couches, y compris la dilution, les interactions du plus proche voisin, le champ cristallin et le champ magnétique externe, est donné par l'expression :

$$\mathcal{H} = -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i S_i \varepsilon_j S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} \varepsilon_k \sigma_k \varepsilon_l \sigma_l - J_{S\sigma} \sum_{\langle m,n \rangle} \varepsilon_m S_m \varepsilon_n \sigma_n \quad (\text{IV.1})$$

$$- \Delta_S \sum_i (\varepsilon_i S_i)^2 - \Delta_\sigma \sum_j (\varepsilon_j \sigma_j)^2 - H \left(\sum_i \varepsilon_i S_i + \sum_j \varepsilon_j \sigma_j \right)$$

Les notations $\langle i, j \rangle$, $\langle k, l \rangle$ et $\langle m, n \rangle$ désignent les premiers sites voisins occupés par différents spins dans chaque couche (L1 et L2). Les paramètres J_{SS} et $J_{\sigma\sigma}$ sont les constantes d'interaction de couplage d'échange entre les deux premiers spins voisins les plus proches (S-S) et (σ - σ), respectivement. Alors que $J_{S\sigma}$ est l'interaction de couplage d'échange entre les spins S et σ , entre deux couches et dans chacune d'elles. Les sommations indiquées dans l'équation (IV.1) s'appliquent à tous les sites du système.

Les coefficients ε_i sont des variables aléatoires non corrélées prenant les valeurs $\varepsilon_i = 1$ avec une probabilité P (site magnétique) ou $\varepsilon_i = 0$ avec une probabilité $1 - P$ (site non magnétique). H est le champ magnétique externe tandis que Δ_S et Δ_σ représentent les champs cristallins par

rapport aux spins S et σ , respectivement. Nous limiterons nos calculs dans cette étude au cas particulier où $\Delta = \Delta_S = \Delta_\sigma$. Afin de simplifier les notations, nous utilisons les paramètres réduits comme suit: $R_1 = J_{ss}/J_{\sigma\sigma}$, $R_2 = J_{s\sigma}/J_{\sigma\sigma}$, $h = H/J_{\sigma\sigma}$, $d = \Delta/J_{\sigma\sigma}$ et $t = T/J_{\sigma\sigma}$ (T est la température absolue).

Les formules utilisées dans ce chapitre pour tracer les des aimantations et les susceptibilités sont données dans l'annexe 2.

IV.3 Résultats et discussion

IV.3.1 Diagramme de phases de l'état fondamental

Dans la présente section, nous étudions les diagrammes de phases de l'état fondamental de la structure de borophène à deux couches avec des spins mixtes $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ et $S = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$, comme il est schématisé sur la figure IV-1. On rappelle que le nombre d'états est donné par $(2S + 1)$ pour le spin S et $(2\sigma + 1)$ pour le spin σ . Le nombre total de configurations stables est : $(2S + 1) \times (2\sigma + 1) = 24$. Dans cette sous-section, tous les résultats sont établis dans le cas pur ($P_s = P_\sigma = 1$).

Afin d'inspecter l'effet du champ cristallin réduit et du champ magnétique externe, nous présentons les résultats obtenus sur la figure IV-2(a), correspondant aux diagrammes de phases de l'état fondamental du système étudié dans le plan (d, h) , pour des valeurs des paramètres réduits fixes : $R_1 = 1$ et $R_2 = -1$. D'après cette figure, seule quatorze configurations stables se trouvent dans quatorze régions distinctes, à savoir: $(+5/2, -1/2)$; $(+3/2, +1/2)$; $(+1/2, +1/2)$; $(+3/2, -1/2)$; $(+5/2, -3/2)$; $(+1/2, -1/2)$ et $(+3/2, -3/2)$ pour h positif et $(-1/2, +1/2)$; $(-3/2, +3/2)$; $(-1/2, -1/2)$; $(-3/2, +1/2)$; $(-5/2, +3/2)$; $(-3/2, -1/2)$; $(-5/2, +1/2)$ pour h négatif. Cette figure fournit une symétrie parfaite des configurations par rapport à l'axe $h = 0$.

Sur la figure IV-2(b), nous présentons les diagrammes de phases de l'état fondamental dans le plan (R_1, h) , en l'absence du champ cristallin réduit et pour $R_2 = -1$. A partir de cette figure, nous avons trouvons les mêmes configurations stables que celles obtenues sur la figure IV-2(a) à l'exception des deux configurations $(+3/2, -1/2)$ et $(-3/2, -1/2)$ qui sont remplacées par $(-1/2, -3/2)$ et $(-1/2, +3/2)$.

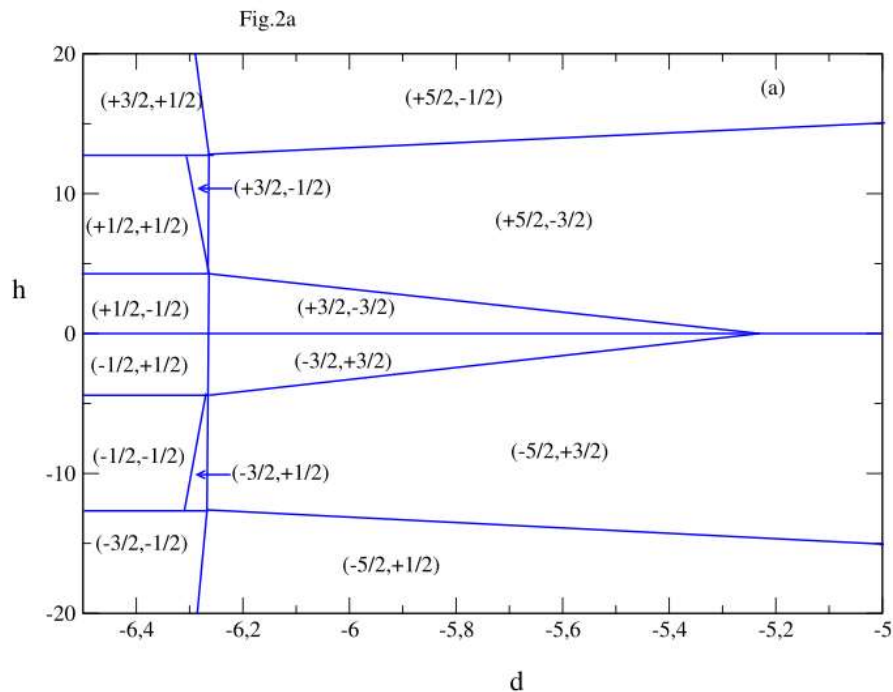
De plus, la figure IV-2(c) est tracée dans le plan (R_2, h) , en l'absence du champ cristallin réduit. Dans ce plan, il n'y a que quatre configurations stables : $(+5/2, -3/2)$; $(+5/2, +3/2)$; $(-5/2, +3/2)$

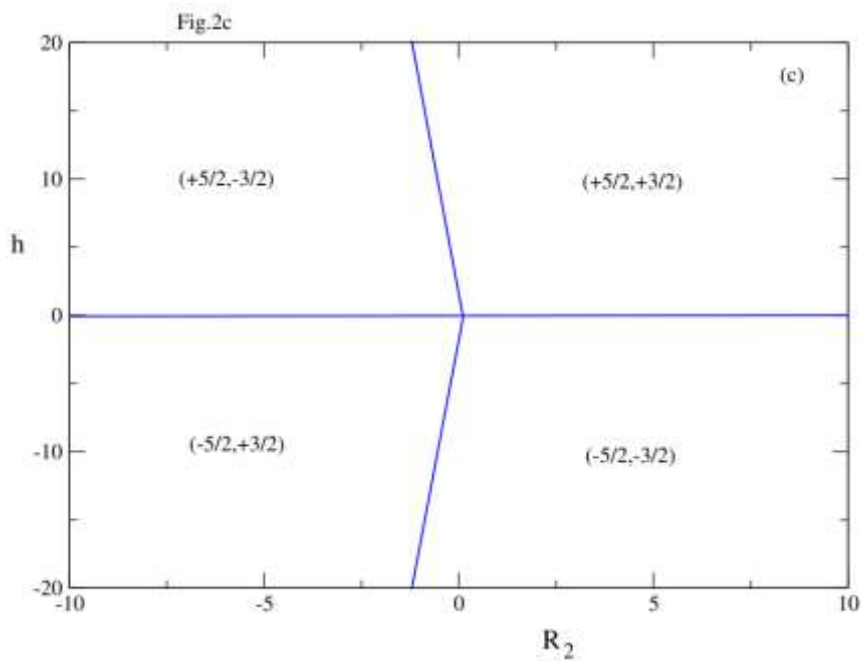
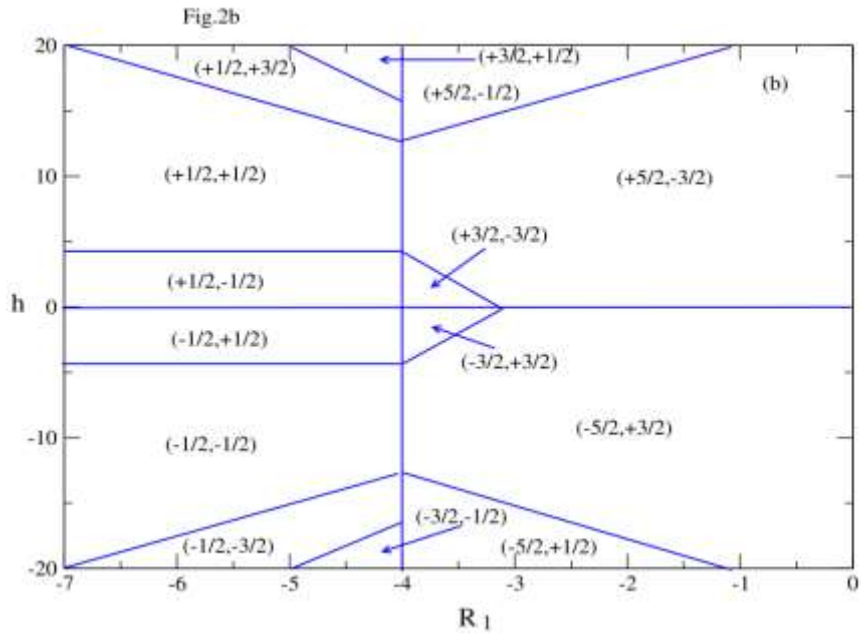
et $(-5/2, -3/2)$. Ces phases correspondent à des moments de spin maximum ($S = \pm 5/2$ et $\sigma = \pm 3/2$). Notons que les quatre phases magnétiques coexistent au point ($R_2 = 0, h = 0$).

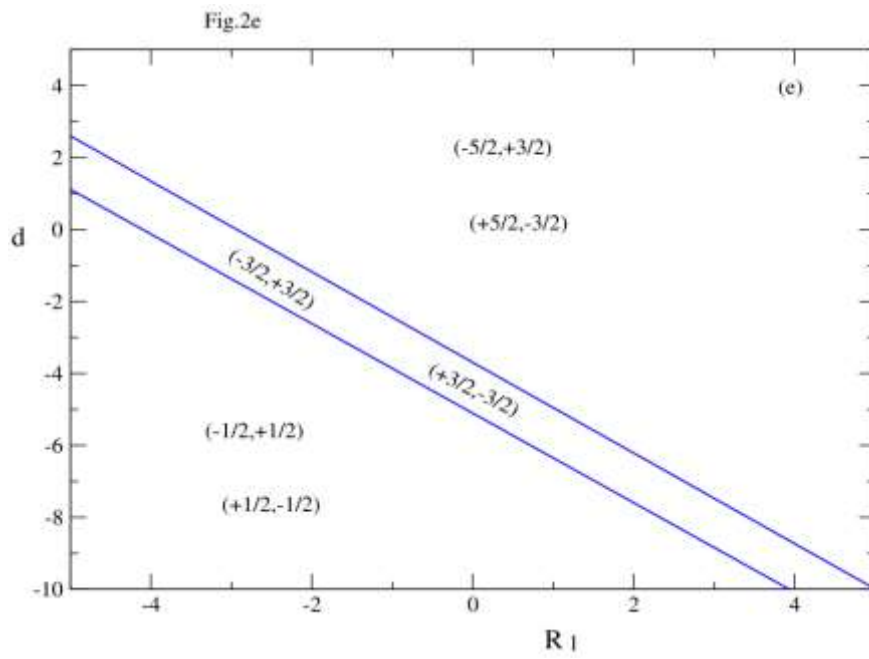
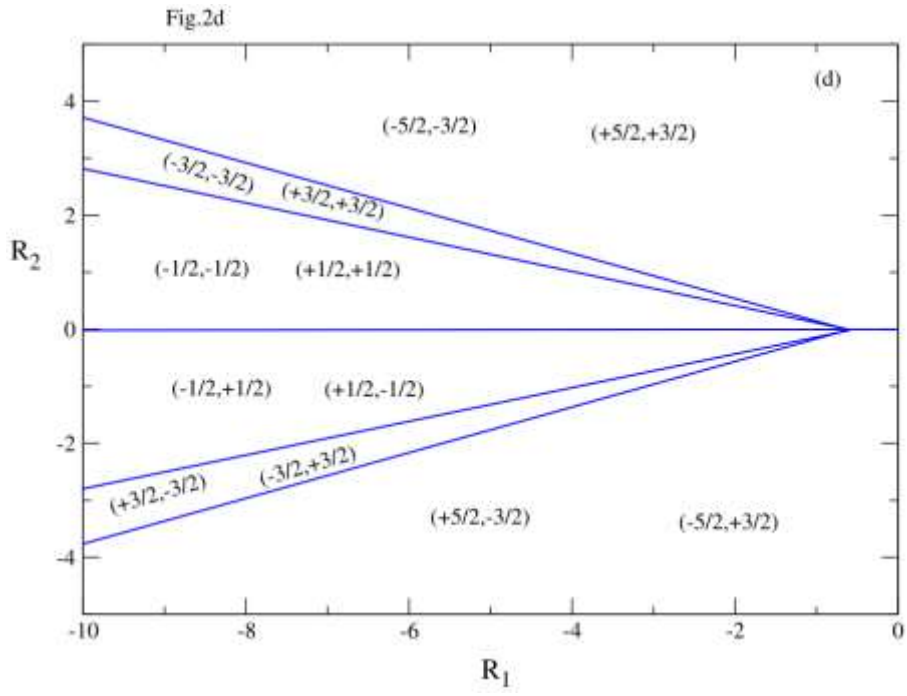
La figure IV-2(d) illustre les diagrammes de phases de l'état fondamental de la structure de borophène bicouches étudiée dans le plan (R_1, R_2) , pour $h = 0$ et $d = 0$. Dans ce plan, il existe douze configurations stables à savoir: $(-5/2, -3/2)$; $(+5/2, +3/2)$; $(-3/2, -3/2)$; $(+3/2, +3/2)$; $(-1/2, -1/2)$ et $(+1/2, +1/2)$ pour R_2 positif et $(-5/2, +3/2)$; $(+5/2, -3/2)$; $(+3/2, -3/2)$; $(-3/2, +3/2)$; $(-1/2, +1/2)$ et $(+1/2, -1/2)$ pour R_2 négatif.

Sur la figure IV-2(e), nous considérons le plan (R_1, d) , en l'absence du champ magnétique externe, pour la valeur fixe de l'interaction de couplage d'échange $R_2 = -1$. Sur cette figure, seules six configurations sont stables, à savoir : $(-5/2, +3/2)$; $(+5/2, -3/2)$; $(+3/2, -3/2)$; $(-3/2, +3/2)$; $(-1/2, +1/2)$ et $(+1/2, -1/2)$.

Enfin, afin d'inspecter les configurations stables dans le plan (R_2, d) , nous illustrons sur la figure VI-2(f) les résultats obtenus pour $R_1 = 1$ et $h = 0$. Sur cette figure, le nombre et la nature des configurations stables sont les mêmes que ceux déjà obtenus dans le plan (R_1, R_2) (voir figure VI-2(d)).







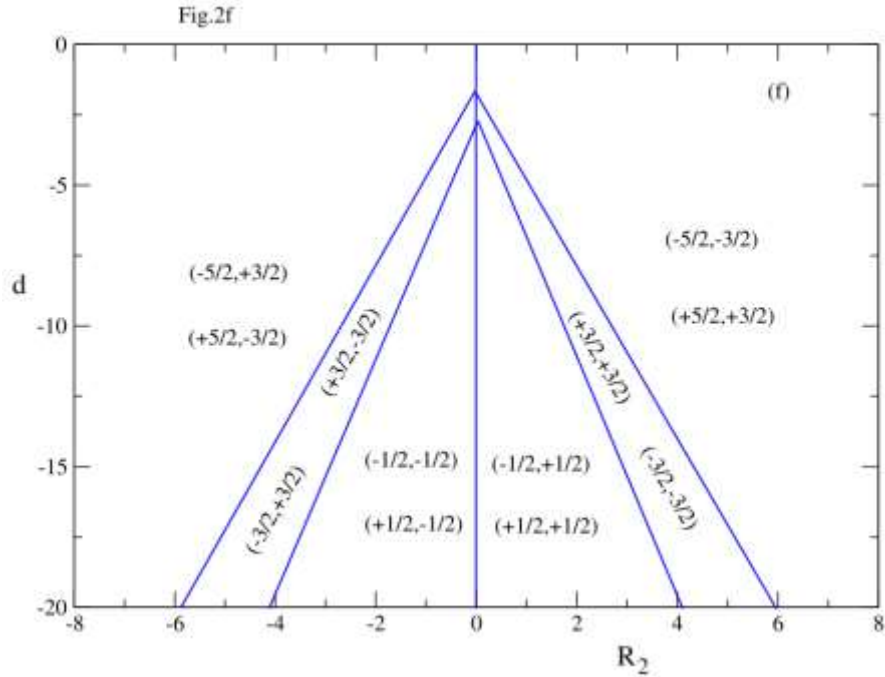


Figure IV-2: Diagrammes de phases à l'état fondamental de la structure de borophène à deux couches avec spins mixtes $(3/2, 5/2)$, (a) dans le plan (d, h) pour $R_1=1$ et $R_2=-1$, (b) dans le plan (R_1, h) pour $R_2=-1$ et $d=0$, (c) dans le plan (R_2, h) avec $d=0$ et $R_1=1$, (d) dans le plan (R_1, R_2) pour $h=0$ et $d=0$, (e) dans le plan (R_1, d) pour $R_2=-1$ et $h=0$, (f) dans le plan (R_2, d) pour $R_1=1$ et $h=0$.

IV.3.2 Résultats de la simulation par la méthode de Monte Carlo

IV.3.2.1 Comportement thermique des aimantations et susceptibilités dans le cas pur

Dans cette section, nous étudions les propriétés magnétiques de la structure de borophène bicouches, avec les spins mixtes $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ et $S = \pm 5/2, \pm 3/2, \pm 1/2$ pour des valeurs de température non nulles. Avant d'étudier l'effet de la dilution, nous discutons d'abord le comportement thermique des aimantations et des susceptibilités partielles et totales du système non dilué (cas pur, $P_S = P_\sigma = 1$; P_S et P_σ sont les probabilités de dilution pour les spins S et σ , respectivement). En effet, la figure IV-3(a) est établie pour des valeurs fixes des paramètres réduits $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$, $d = 0$ et $P_S = P_\sigma = 1$. Aux très basses températures, les aimantations partielles ont les valeurs de saturation $M_\sigma = + 1.5$ et $M_S = -2.5$ pouvant être confirmées par les diagrammes de phases de l'état fondamental. En revanche, l'aimantation totale commence par la valeur $M_{\text{tot}} = - 0.5$. D'autre part, la figure IV-3(b) rapporte la variation thermique des susceptibilités totales et partielles. Cette figure montre que la valeur de la température de transition réduite est d'environ $t_{tr} \approx 6$.

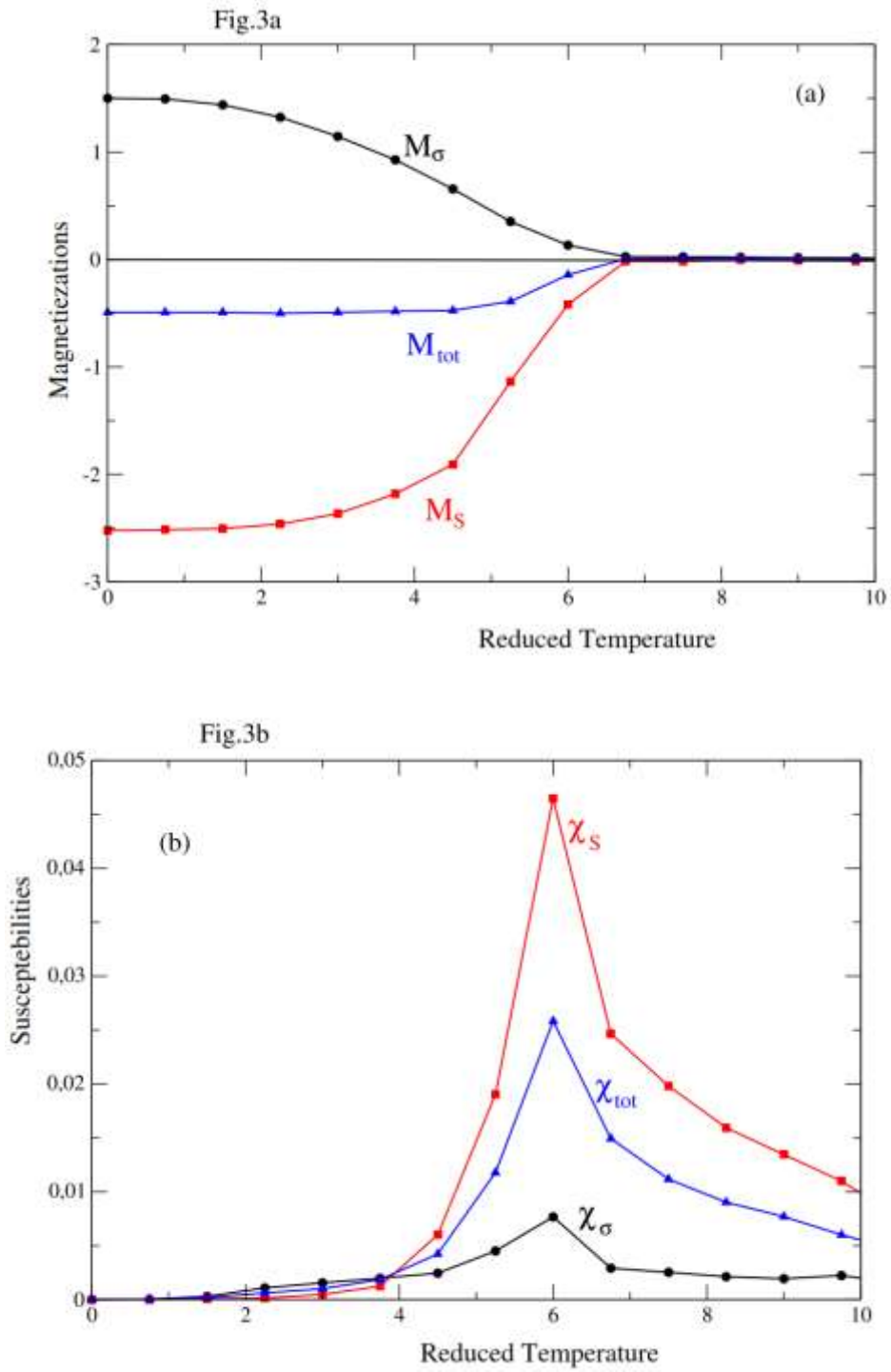
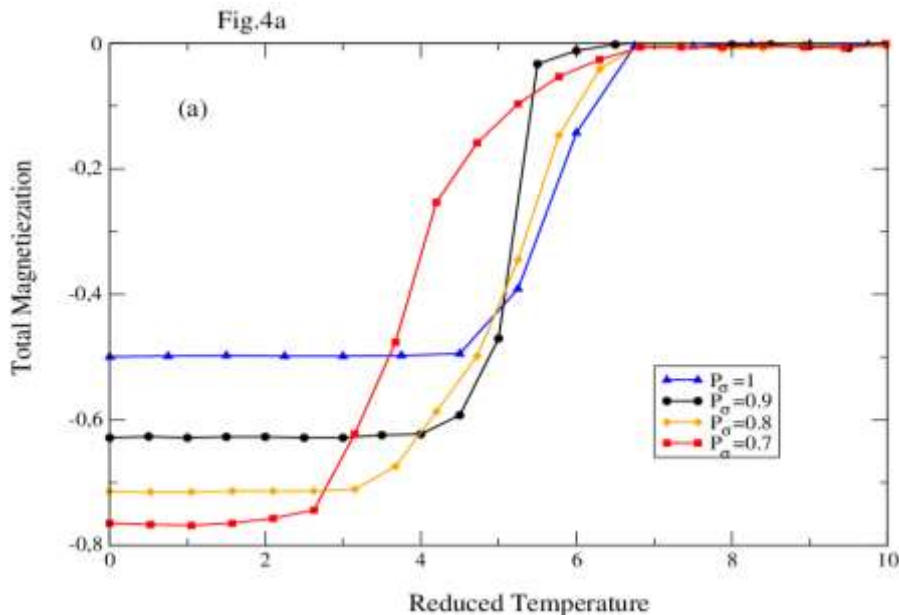


Figure IV-3: Comportement thermique des aimantations (a) et des susceptibilités (b) dans le cas pur, pour des valeurs fixes des paramètres $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$ et $d = 0$.

IV.3.2.2 Effet de probabilité de dilution sur le comportement de l'aimantation et de la susceptibilité

Afin de montrer l'effet de la probabilité de dilution P_σ , sur les spins σ , de l'aimantation totale et de la susceptibilité totale pour $P_S = 1$, nous représentons les résultats obtenus sur les figures IV-4(a) et IV-4(b). Ces figures ont été tracées pour des valeurs fixes des paramètres réduits : $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$ et $d = 0$. Notons que $P_\sigma = 1$ correspond au cas pur, tandis que $P_\sigma = 0.9, 0.8$, et 0.7 signifie que les dilutions par des atomes non magnétiques dans le système étudié sont 10%, 20% et 30%, respectivement.

Lorsque la température du système est inférieure à la température de transition ($t < t_{tr}$), l'augmentation de la dilution de spin σ (diminution la probabilité P_σ de 1 à 0.7) augmente les aimantations totales dans leurs valeurs absolues. En effet, cela peut s'expliquer par le fait que le système est dans son état ferrimagnétique, les moments de spin ont de signes opposés, donc une diminution des aimantations partielles du spin σ donne lieu à une augmentation de l'aimantation totale dans sa valeur absolue. Un tel effet n'apparaît pas à l'état paramagnétique. En outre, la figure IV-4(b) montre que la diminution de la probabilité de dilution P_σ conduisent à une diminution de la température de transition réduite, confirmée par le déplacement du pic vers des températures plus basses.



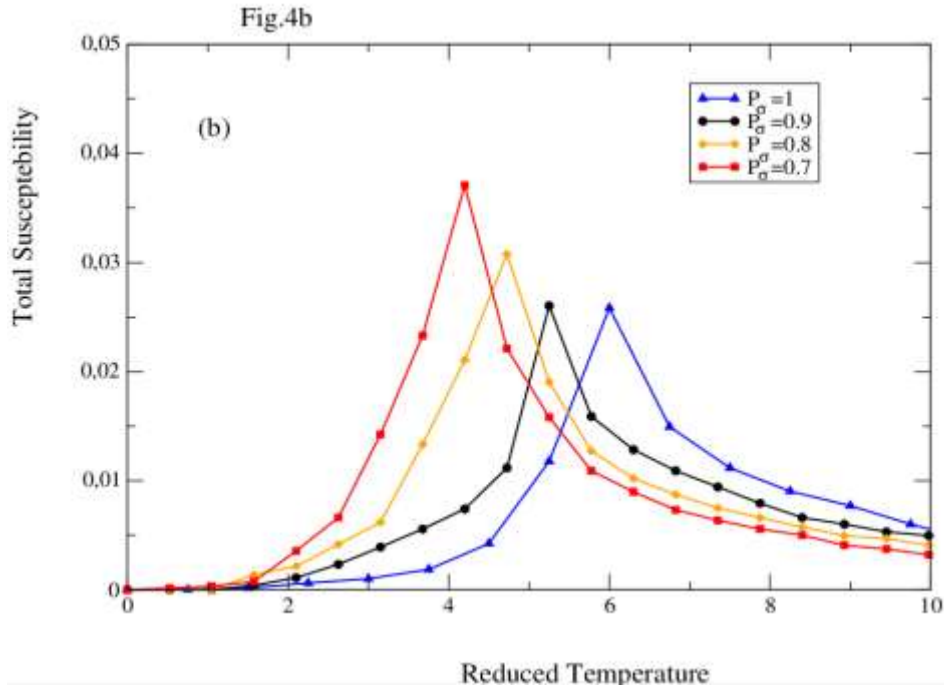


Figure IV-4: Effet de la probabilité de dilution P_σ en fonction de la température pour: $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$, $P_S = 1$ et $d = 0$ (a) sur les aimantations totales, (b) sur les susceptibilités totales.

Pour compléter l'étude, nous considérons l'effet de la probabilité de dilution des spins S (P_S), sur les propriétés magnétiques du système considéré. Pour cela, nous introduisons la probabilité de dilution uniquement sur les spins S. En effet, les figures IV-5(a) et VI-5(b) présentent l'effet de la probabilité de dilution P_S sur l'aimantation totale et la susceptibilité totale pour $P_\sigma = 1$. Sur la figure IV-5(a), contrairement à la figure IV-4(a), nous constatons qu'en augmentant la probabilité de dilution (P_S diminue de 1 à 0.7), l'aimantation totale diminue dans sa valeur absolue pour $t < t_{tr}$. En effet, en phase ferrimagnétique, le moment de spin dilué est négatif ($-5/2$), et le non-dilué est positif ($+3/2$). Alors que pour $t > t_{tr}$, le système est dans sa phase paramagnétique, la dilution n'a aucun effet sur aucun type de spins. Par ailleurs, la figure IV-5(b) montre que la probabilité de dilution favorise le passage rapide du système de la phase ferrimagnétique à la phase paramagnétique. En fait, ce comportement est confirmé par le déplacement des pics de la susceptibilité vers les basses températures.

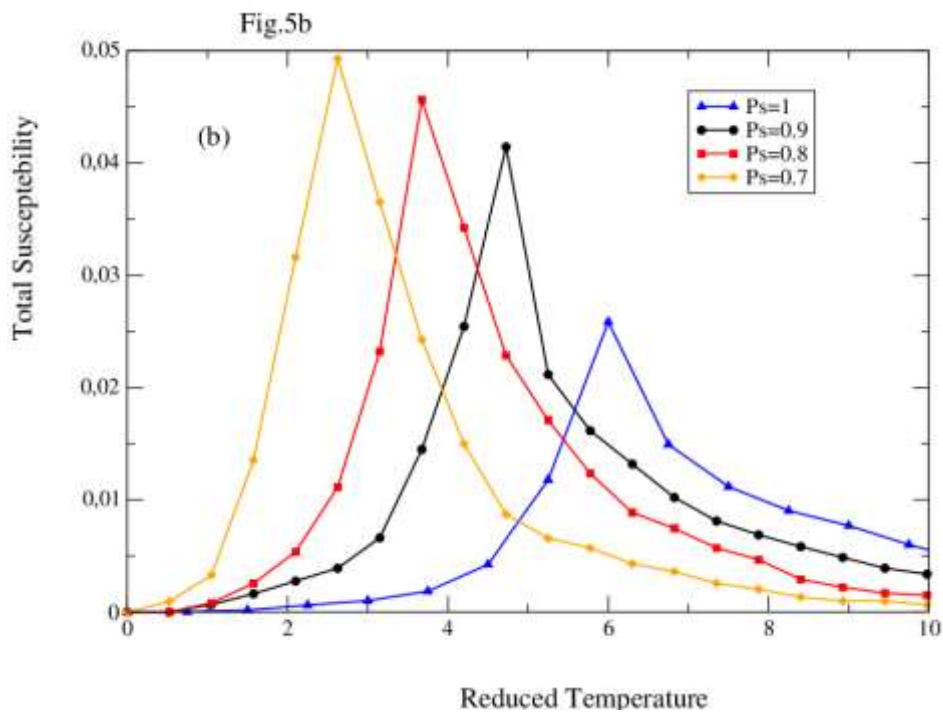
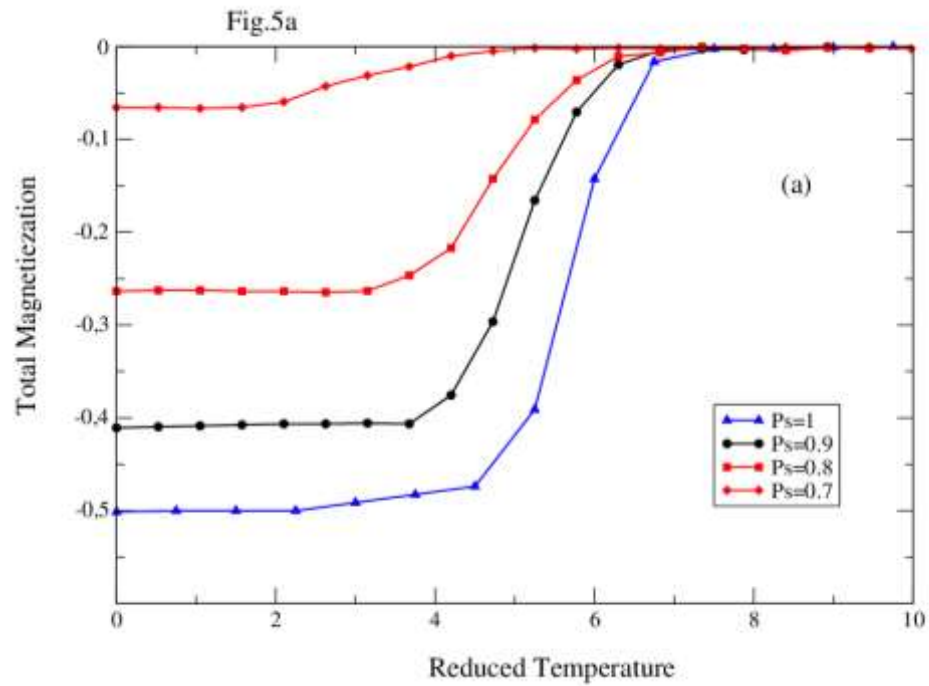
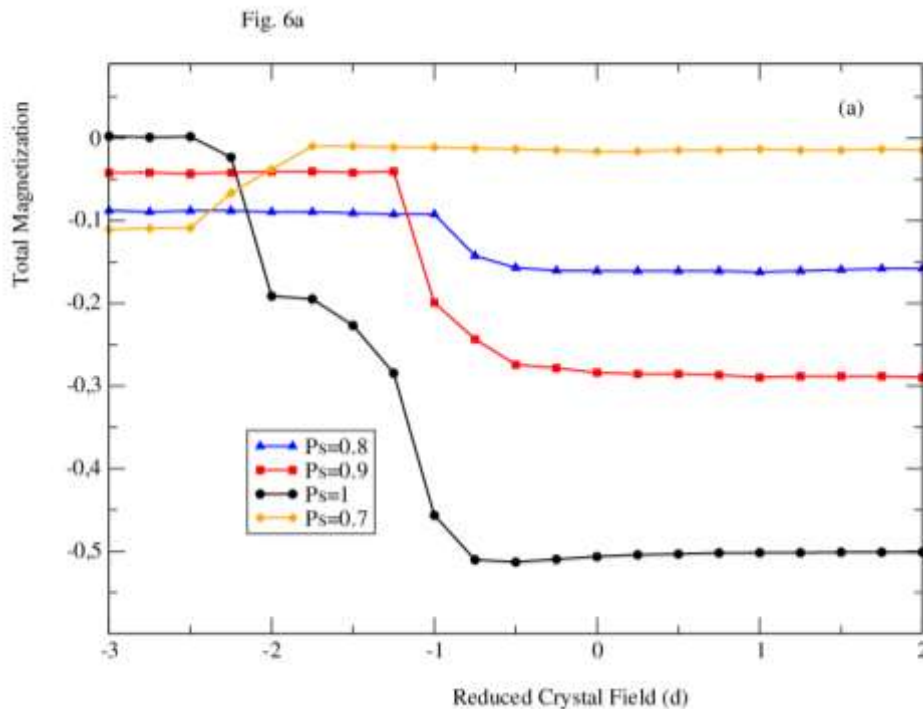


Figure IV-5: Effet de la probabilité de la dilution P_S en fonction de la température pour : $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$, $P_\sigma = 1$ et $d = 0$, (a) sur l'aimantation totale, (b) sur la susceptibilité totale.

IV.3.2.3 Comportement de l'aimantation totale par rapport au champ cristallin

Pour étudier le comportement de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit en présence de la dilution, nous présentons les résultats obtenus sur les figures IV-6a et IV-6(b). Ces courbes ont été tracées pour des valeurs des paramètres réduits fixes : $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$ et température réduite $t = 1$. Nous constatons sur la figure IV-6(a) que pour une valeur donnée de $P_S \geq 0.8$, la valeur absolue de l'aimantation totale augmente pour le champ cristallin réduit approximativement égal à -1, tandis qu'une dilution importante ($P_S = 0.7$ correspondant à 30 % de l'atome S non magnétique) conduit à inverser ce comportement. D'un autre côté, la figure IV-6(b) montre que la dilution des spins σ présente trois intervalles, à savoir : $d \leq -2.5$, $-2.5 \leq d \leq -1.5$ et $d \geq -1.5$. La valeur absolue de l'aimantation totale augmente lorsqu'elle passe d'un intervalle à l'autre, et restant presque constante dans chaque intervalle.



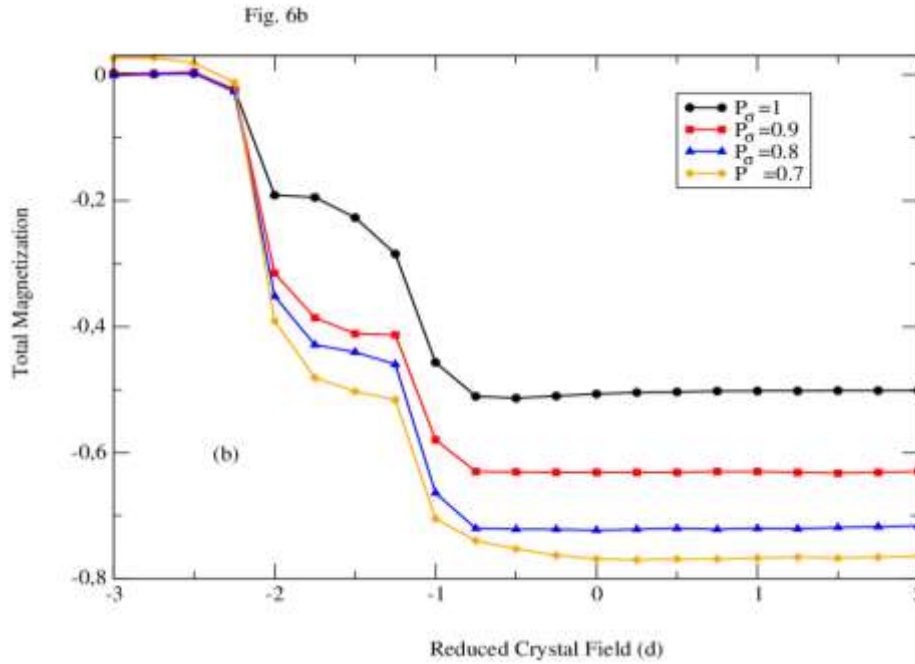


Figure IV-6: Comportement de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin pour $R_1 = 0.5$, $R_2 = -0.1$, $h = 0$ et $t = 1$, (a) effet de P_s , pour $P_\sigma = 1$ (b) effet de P_σ , pour $P_s = 1$.

IV.3.2.4 Effet de la dilution sur les cycles d'hystérésis pour la structure de borophène bicouches

Les figures IV-7(a) et IV-7(b) montrent l'aimantation totale en fonction du champ magnétique externe, pour des valeurs fixes des paramètres réduits : $t = 0.5$, $R_1 = 0.5$ et $R_2 = -0.1$, en l'absence du champ cristallin réduit. La figure IV-7(a) présente l'effet de la probabilité de dilution P_s dans le cas pur des spins σ ($P_\sigma = 1$). Alors que la figure IV-7(b) rapporte la variation des cycles d'hystérésis lors de la variation de la valeur de P_σ dans le cas pur des spins S ($P_s = 1$). Nous remarquons que sur les deux figures IV-7(a) et IV-7(b), la forme des boucles du système étudié est fortement dépendante de la variation des paramètres P_σ et P_s . En effet, en diminuant séparément, les deux probabilités de dilution P_σ et P_s , les paramètres spécifiques tels que le champ coercitif, les surfaces des boucles, la saturation et la rémanence des aimantations diminuent.

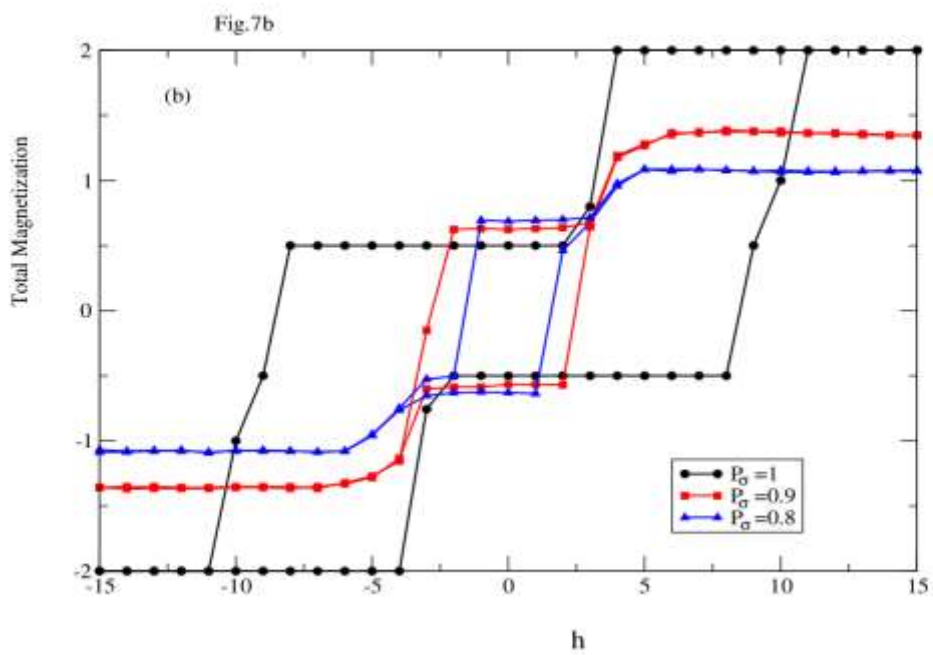
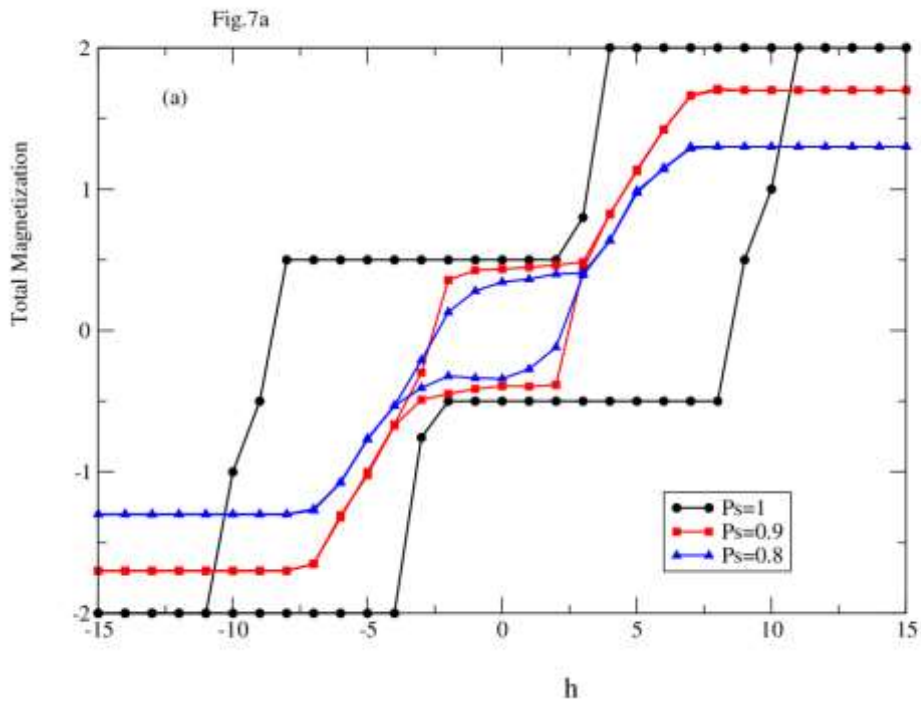


Figure IV-7: Effet de la dilution sur les cycles d'hystérésis pour valeurs fixes des paramètres : $R_1 = 0,5$, $R_2 = -0,1$, $t = 0,5$ et $d = 0$, (a) la variation de la probabilité de dilution P_s dans le cas pur des spins σ ($P_\sigma = 1$), (b) la variation de la probabilité de la dilution P_σ .

IV.4 Conclusion

Nous avons étudié, dans ce chapitre, les diagrammes de phases d'une structure de borophène à deux couches avec des spins mixtes $\sigma = \pm 3/2$ et $S = \pm 5/2$. Nous avons établi ces diagrammes à l'état fondamental en considérant différents paramètres physiques (R_1 , R_2 , h et d). Nous avons abordé ensuite, par la méthode de Monte Carlo, les effets de la dilution (spins σ et S) sur les propriétés magnétiques du système. Les résultats obtenus montrent que la probabilité de dilution affecte fortement le l'effet thermique des aimantations et susceptibilités magnétiques totales et partielles. En outre, la diminution des deux probabilités de dilution P_σ et P_S influencent les paramètres spécifiques des cycles d'hystérésis.

**CHAPITRE V: TEMPERATURE DE COMPENSATION
DE LA STRUCTURE NANO-DICORONYLENE A TROIS
COUCHES AVEC SPINS MIXTES FERRIMAGNETIQUES**

(3 / 2 , 1)

V.1 Introduction

Actuellement, comme nous l'avons indiqué dans le premier chapitre l'intérêt croissant pour la nanotechnologie se concentre sur différents matériaux nano-magnétiques en raison de leurs propriétés magnétiques exceptionnelles. Ces matériaux présentent une réactivité de surface très élevée et de nombreuses propriétés électriques et magnétiques intéressantes [142–144]. En général, les propriétés de surface apportent des contributions rigoureuses aux propriétés magnétiques. Des travaux expérimentaux récentes ont été développées également pour expliquer le comportement des propriétés magnétiques lors de la diminution de la dimension de ces matériaux [145–147]. Dans ce chapitre, en utilisant des simulations de Monte Carlo, nous explorons les propriétés magnétiques (telles que l'aimantation totale, la susceptibilité magnétique totale et les températures de compensation et de blocage) sous l'algorithme de Metropolis [148] de la structure nano-dicoronylène sous le modèle de Blume-Capel [12,140,141,149,150]. Dans la littérature, cette structure est appelée parfois benzo-dicoronylène, c'est un hydrocarbure aromatique polycyclique de formule $C_{48}H_{20}$. La structure de dicoronylène est formée de quinze noyaux benzéniques fusionnés. D'une autre part, le système étudié est composé de trois couches étendues de structure de nano-dicoronylène. Chaque couche contient 48 atomes ; le nombre total de spins dans le système étudié est $48 \times 3 = 144$. Les couches supérieure et inférieure sont composées des spins S ($S = 0, \pm 1$) avec 96 atomes, tandis que la couche intermédiaire est composée des spins σ ($\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$) avec 48 atomes. De plus, nous présentons d'abord les diagrammes de phases de l'état fondamental pour une température nulle pour différents plans des paramètres physiques. Nous discutons ensuite la variation thermique de l'aimantation totale pour plusieurs valeurs des paramètres de couplage. A la fin du chapitre, les cycles d'hystérésis en fonction de différents paramètres physiques seront présentés et discutés.

V.2 Théorie et modèle

La structure de type nano-dicoronylène étudiée est formée de deux types d'atomes, comme illustré sur la figure V-1, disposés ensemble dans une structure à trois couches. Chaque couche est composée exclusivement d'un des deux types possibles de spins mixtes ferrimagnétiques, $S = 0, \pm 1$ ou $\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$ avec le modèle de Blume-Capel. Les couplages d'échange ferromagnétique et anti-ferrimagnétique sont considérés respectivement dans chaque plan et entre deux plans. Les couches supérieure et inférieure contiennent $N_s = 48 + 48$ de spins S ,

tandis que le plan du milieu contient $N\sigma = 48$ des spins σ . Le nombre total des spins, dans le système étudié, est alors $N_{\text{tot}} = 48 \times 3 = 144$.

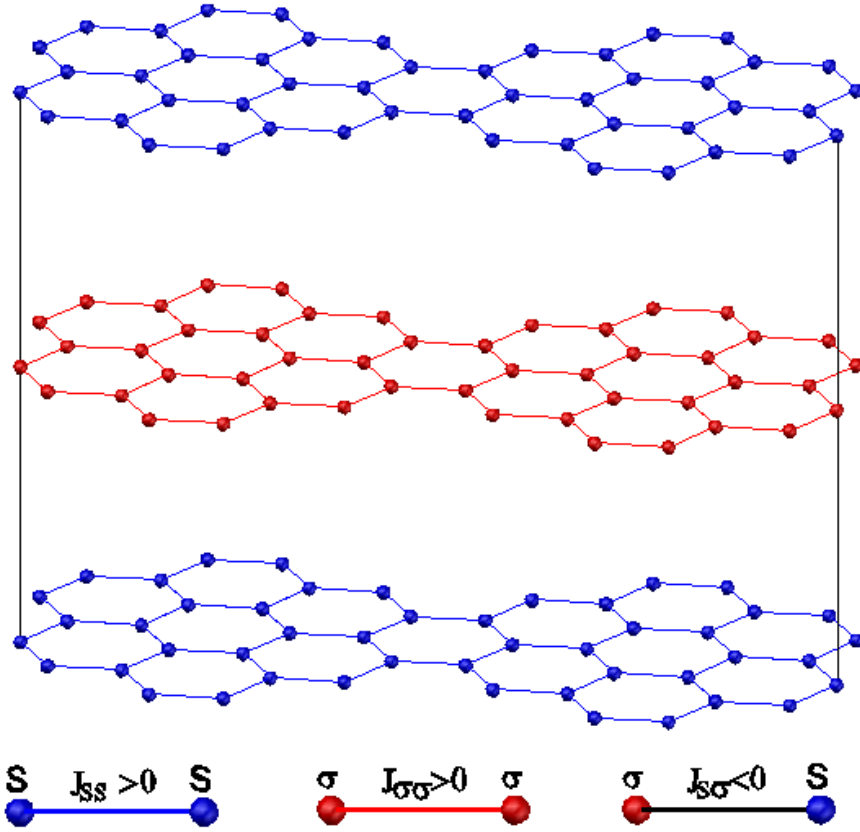


Figure V-1: Représentation d'une structure composée de trois couches de nano-dicoronylène avec spins mixtes $S = 0, \pm 1$ ou $\sigma = \pm 1/2, \pm 3/2$.

L'Hamiltonien de la structure de type nano-dicoronylène à trois couches est donné par l'équation suivante :

$$\mathcal{H} = -J_{SS} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_{\sigma\sigma} \sum_{\langle k,l \rangle} \sigma_k \sigma_l - J_{S\sigma} \sum_{\langle m,n \rangle} S_m \sigma_n \quad (\text{V.1})$$

$$- \Delta_S \sum_i (S_i)^2 - \Delta_\sigma \sum_j (\sigma_j)^2 - H \left(\sum_i S_i + \sum_j \sigma_j \right)$$

où les notations $\langle i,j \rangle$, $\langle k,l \rangle$ et $\langle m,n \rangle$ représentent les premiers sites voisins occupés par différents types de spins. J_{SS} et $J_{\sigma\sigma}$ sont les constantes d'interactions de couplage d'échange entre les deux premiers spins voisins les plus proches (S-S) et (σ - σ), respectivement dans chaque couche. $J_{S\sigma}$ est le paramètre de couplage d'échange entre les spins (S- σ). H représentent le

champ magnétique externe. Δ_S Et Δ_σ représentent les champs cristallins des spins S et σ , respectivement. Pour simplifier, nous limiterons nos calculs au cas particulier où $\Delta = \Delta_S = \Delta_\sigma$.

Pour simplifier les notations, nous utilisons dans la suite les paramètres réduits: $R_1 = J_{S\sigma}/J_{\sigma\sigma}$, $R_2 = J_{SS}/J_{\sigma\sigma}$, $h = H/J_{\sigma\sigma}$, $t = T/J_{\sigma\sigma}$, et $\delta = \Delta/J_{\sigma\sigma}$. Les formules utilisées sont données en annexe 2.

V.3 Résultats et discussion

V.3.1 Diagrammes de phases de l'état fondamental

Nous commençons l'analyse des résultats en explorant les diagrammes de phases de l'état fondamental de la structure de type nano-dicoronylène à trois couches avec spins mixtes ($\sigma = \pm 3/2, \pm 1/2$), et ($S = 0, \pm 1$). Pour cela, nous étudions la stabilité des phases magnétiques, nous calculons donc les énergies minimales, et nous les comparons pour toutes les configurations possibles. Nous nous sommes basés sur l'Hamiltonien donné dans l'équation (V.1) pour illustrer les six figures V-2.(a-f) qui correspondent à plusieurs plans. En prenant en considération les deux types de spins donnés dans ce travail, nous en déduisons $3 \times 4 = 12$ configurations possibles.

Pour identifier ces configurations possibles dans le plan (δ, h), nous traçons la figure V-2 (a), pour des valeurs des paramètres réduites fixes : $R_1 = -0.02$ et $R_2 = 0.2$. Cette figure est la seule qui donne presque tous les états sauf les deux configurations $(-3/2; 0)$ et $(+3/2; 0)$. Elle montre une symétrie parfaite par rapport à l'axe $h = 0$.

Pour explorer l'effet de l'interaction de couplage d'échange R_2 , nous illustrons la figure V-2 (b) dans le plan (h, R_2), pour des paramètres réduites fixes : $R_1 = -0.02$ et $\delta = 0$. Dans ce plan, il n'y a que quatre configurations stables, à savoir : $(-3/2; -1)$, $(+3/2; +1)$, $(-3/2; 0)$ et $(+3/2; 0)$.

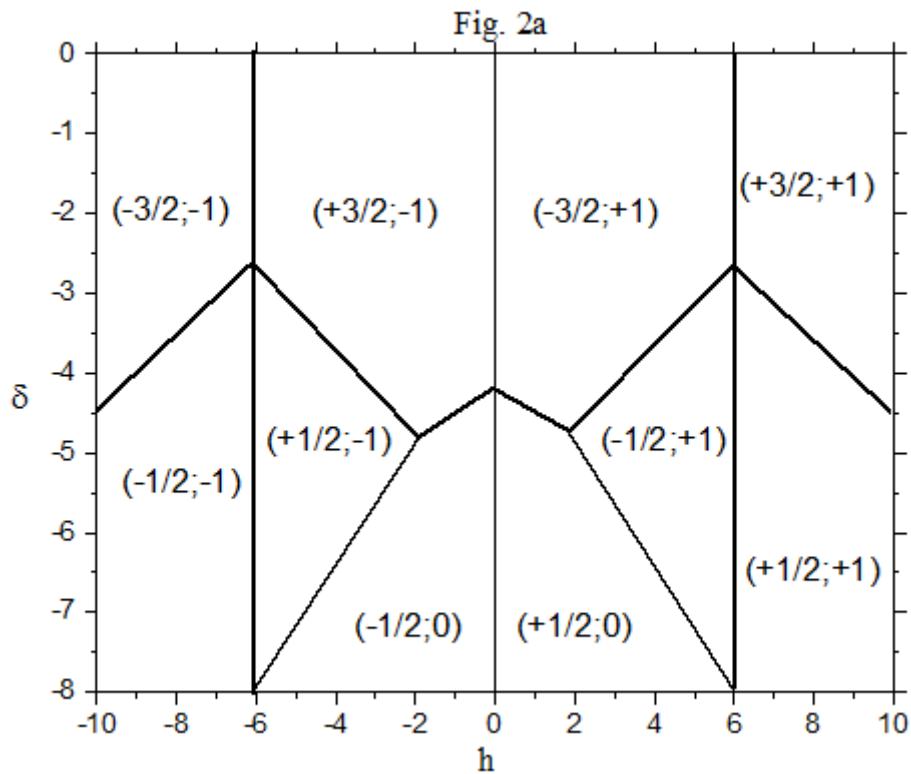
Nous illustrons sur la figure V-2(c) les résultats obtenus dans le plan (h, R_1). Cette figure est tracée en l'absence du champ cristallin et pour $R_2 = 0.2$. Dans ce plan, il n'y a que quatre configurations stables : $(+3/2; +1)$; $(+3/2; -1)$; $(-3/2; +1)$ et $(-3/2; -1)$. Dans ce cas, nous n'obtenons que les spins avec des valeurs extrêmes.

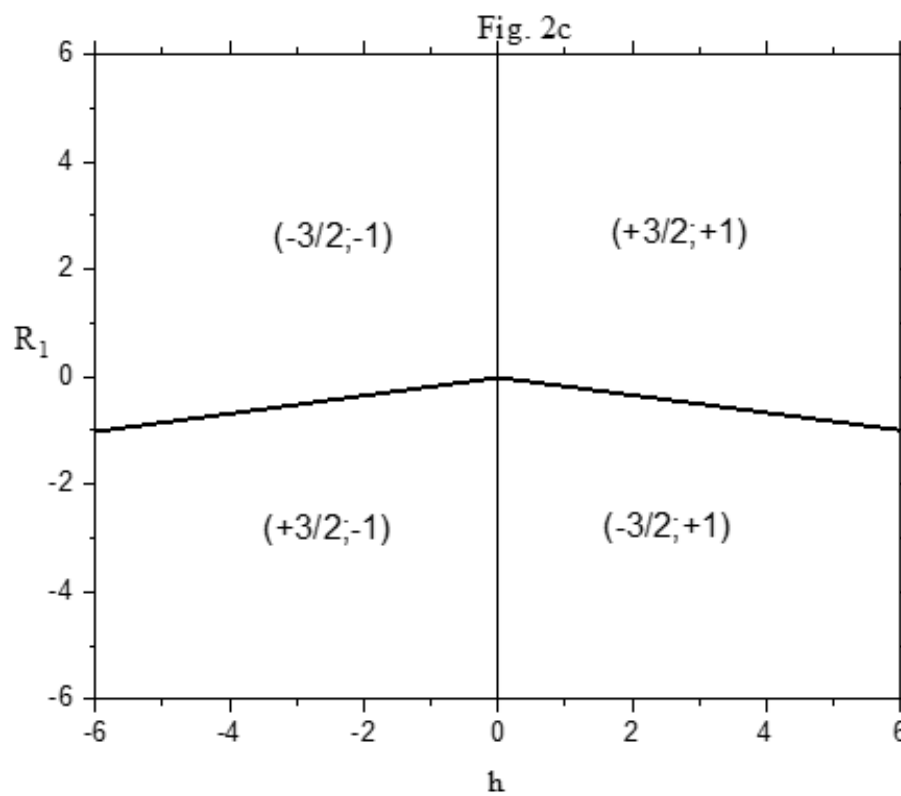
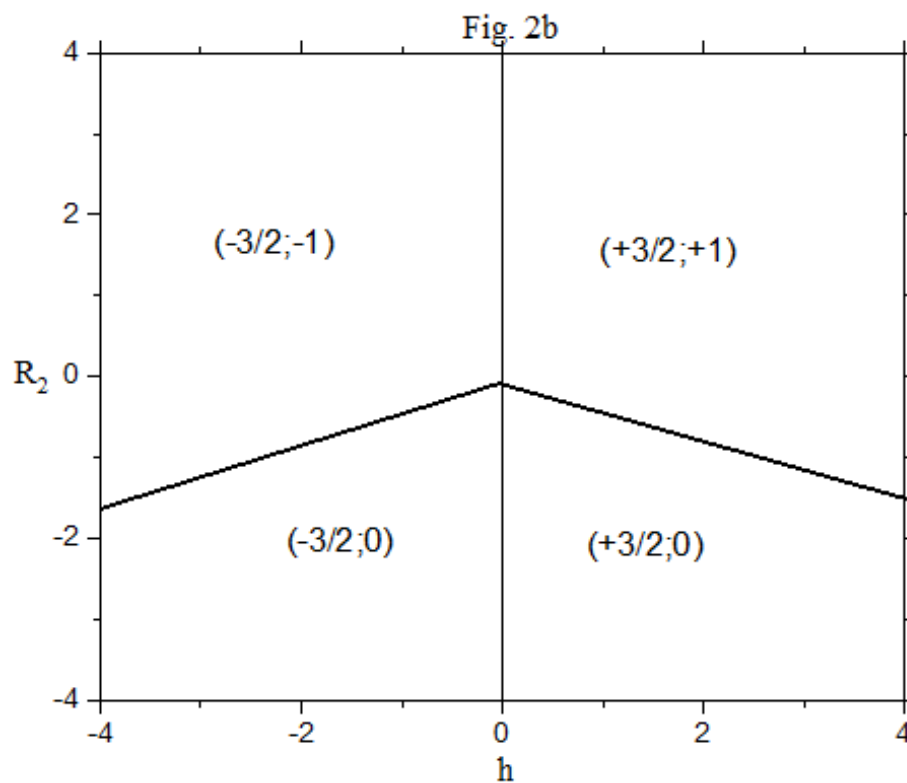
La figure V-2 (d) est représentée dans le plan (R_1, R_2), en l'absence du champ cristallin et en l'absence du champ magnétique externe. Cette figure montre six configurations stables, à savoir : $(+3/2; +1)$, $(-3/2; -1)$, $(-3/2; +1)$, $(+3/2; -1)$, $(+3/2; 0)$ et $(-3/2; 0)$.

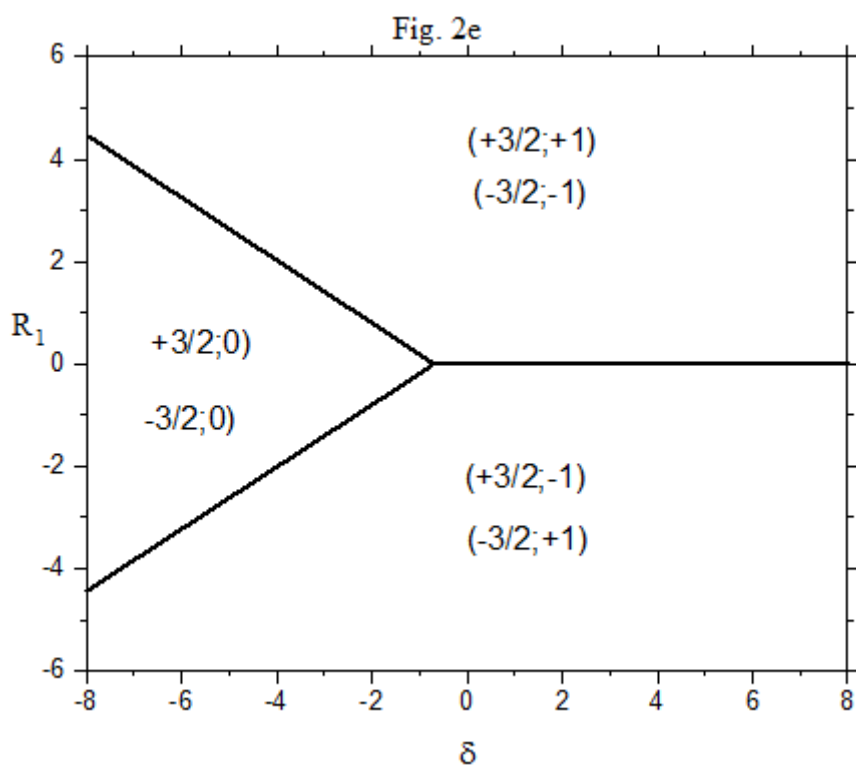
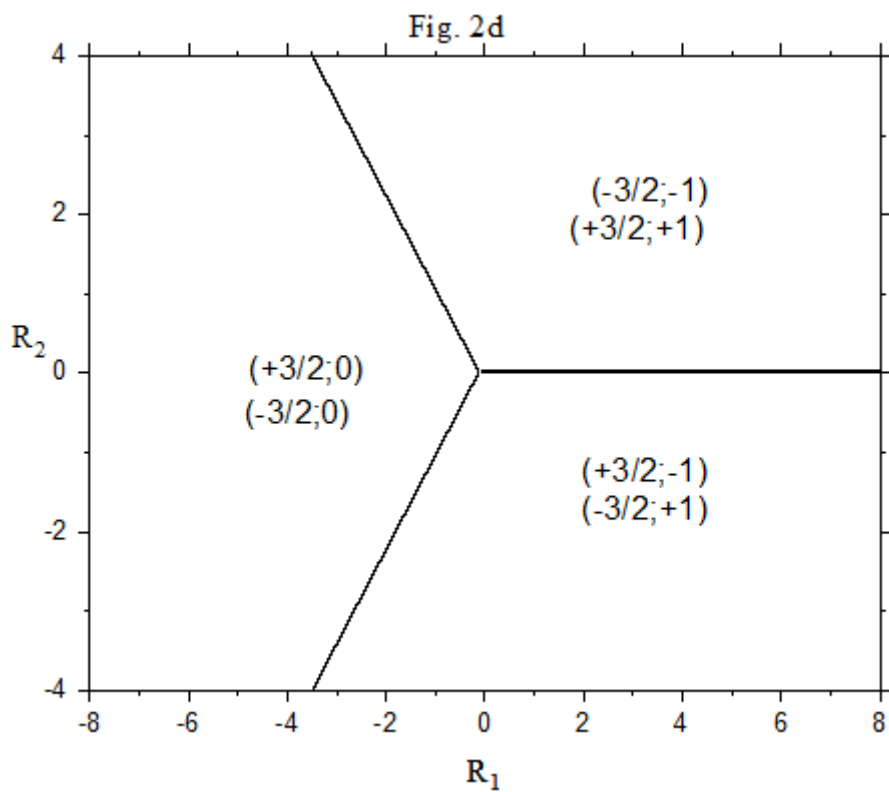
De plus, le plan (δ, R_1) illustré sur la figure V-2(e) fournit les mêmes configurations stables que celles obtenues sur la figure V-2(d). La figure V-2 (e) est représentée en l'absence du champ magnétique externe et pour le paramètre de couplage d'échange réduit fixe $R_2 = 0.2$.

Enfin, nous présentons sur la figure V-2(f), les diagrammes de phases dans le plan (δ, R_2) . La topologie de cette figure est complètement différente de celle des figures précédentes. En effet, elle montre les huit phases stables suivantes : $(-1 / 2; + 1)$, $(+1/2; -1)$, $(+ 3/2; -1)$, $(-3 / 2; + 1)$, $(-1 / 2; 0)$, $(+ 1/2; 0)$, $(+ 3/2; 0)$ et $(-3 / 2; 0)$.

De toutes ces figures correspondant aux six plans des paramètres physiques, nous concluons que ces paramètres affectent bien la topologie des plans et le nombre de configurations stables.







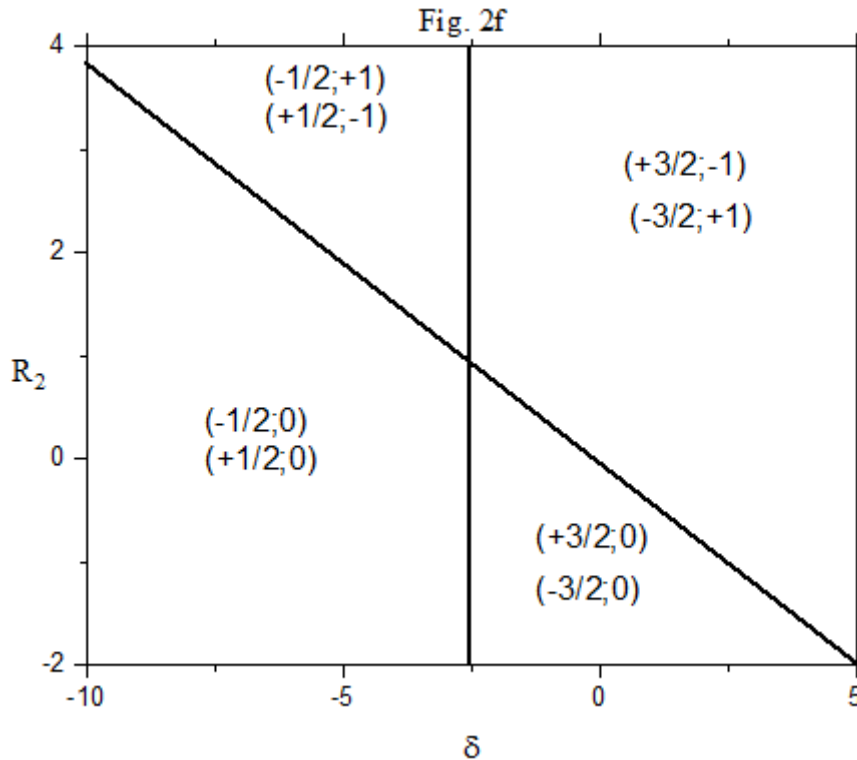


Figure V-2: Diagrammes de phases à l'état fondamental de la structure de type nano-dicoronylène à trois couches. (a) dans le plan (h, δ) pour $R_1 = -0.02$ et $R_2 = 0.2$. (b) dans le plan (h, R_2) pour $\delta = 0$ et $R_1 = -0.02$. (c) dans le plan (h, R_1) pour $\delta = 0$ et $R_2 = 0.2$. (d) dans le plan (R_1, R_2) pour $\delta = 0$ et $R_1 = 0.2$. (e) dans le plan (δ, R_1) pour $h = 0$ et $R_2 = 0.2$. (e) dans le plan (δ, R_2) pour $h = 0$ et $R_1 = -0.02$.

V.3.2 Résultats de simulation Monte Carlo pour la structure de nano-dicoronylène

V.3.2.1 Aimantations et susceptibilités en fonction de la température

Pour explorer l'effet de la température sur divers paramètres physiques, nous utilisons des simulations de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis.

La figure V-3(a) montre le comportement thermique des aimantations partielles et totales de la structure nano-dicoronylène. Cette figure est illustrée pour des valeurs des paramètres réduites fixes: $R_1 = -0.02$, $R_2 = 0.2$, $h = 1$ et $\delta = 0.02$. De cette figure, il est clair qu'à une température très basse, les aimantations partielles sont en bon accord avec les valeurs trouvées dans le cas de l'état fondamental exploré ci-dessus. La courbe de l'aimantation totale part de sa valeur de saturation, qui est calculée par $M_{\text{tot}} = (-3/2 + 1 \times 2) / 3 \approx 0.17$. Comme indiqué sur la figure, la température de compensation correspondant à une phase super-paramagnétique est autour de la valeur $T_{\text{comp}} \approx 2$. Les conditions nécessaires pour avoir le point de compensation ont été explorées dans plusieurs travaux de recherche antérieurs [151,152].

En outre, la variation thermique des susceptibilités totale et partielles est présentée sur la figure V-3(b). D'après cette figure, les pics notables correspondant à la température de blocage sont autour de la valeur 2.5. Notons que les deux pics des susceptibilités partielles ne correspondent pas à la même température. Un tel résultat peut être comparé à ceux obtenus dans Réf. [153].

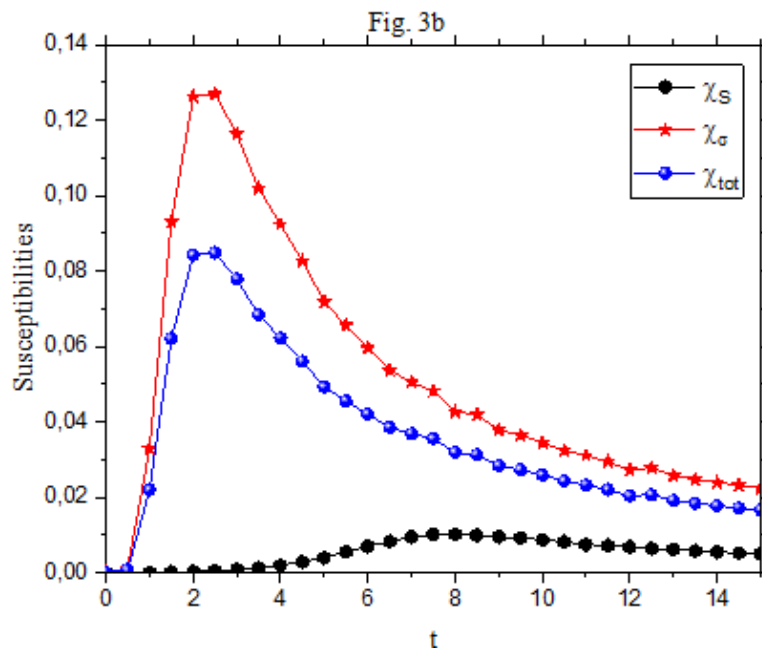
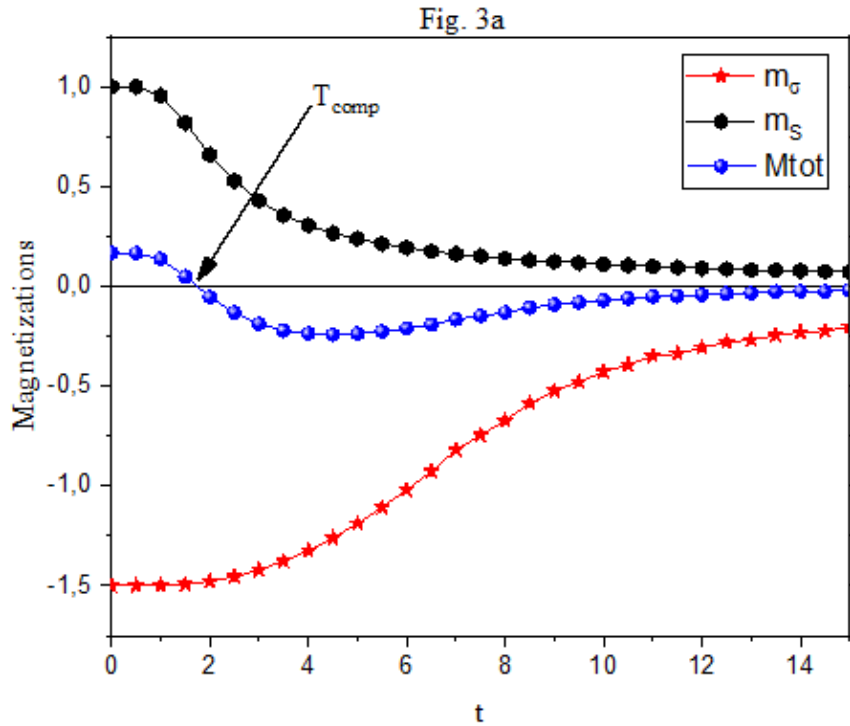


Figure V-3: (a) Aimantations (b) Susceptibilités, en fonction de la température pour des valeurs de paramètres fixes $R_2=0.2$, $R_1=-0.02$, $h=1$ et $\delta = 0.02$.

V.3.2.2 Effets des paramètres de couplage d'échange sur le comportement de l'aimantation et de la susceptibilité

Afin de montrer l'effet de l'interaction de couplage d'échange R_2 sur l'aimantation et la susceptibilité magnétique totale, nous reportons dans la figure V-4(a) et la figure V-4 (b) les résultats obtenus.

De telles figures sont établies pour la valeur fixe du paramètre réduit $R_1 = -0.02$, en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe. Sur la figure V-4 (a), nous constatons que pour des faibles valeurs de température, l'aimantation totale ($M_{tot} \approx 0.17$) n'est pas affectée par la variation du paramètre R_2 . Alors que, pour $t > 1$, l'aimantation totale diminue. De plus, les valeurs de température de compensation et de blocage augmentent lors de l'augmentation du paramètre réduit R_2 . Ce comportement est dû au fait que l'augmentation de la valeur du couplage ferrimagnétique (R_2) tend à maintenir l'ordre dans le système. Par ailleurs, la décroissance de l'aimantation totale est encore plus favorisée pour les faibles valeurs de R_2 , conduisant à une bonne séparation des courbes à $t \approx 4.5$.

Pour des températures élevées ($t > 12$), toutes les aimantations saturent car le système tend vers son état paramagnétique. En outre, la figure V-4(b) montre que la valeur de saturation de la susceptibilité magnétique totale dépend principalement de la variation du paramètre R_2 . En effet, le pic de la susceptibilité magnétique totale, correspondant à la valeur de la température critique, tend vers les températures les plus élevées lors de l'augmentation de la valeur de l'interaction de couplage d'échange réduit R_2 pour les mêmes raisons évoquées ci-dessus.

En revanche, la même courbe est tracée en faisant varier le paramètre R_1 . Cependant, aucune variation significative n'a été obtenue, et ceci est dû à la dominance du couplage ferrimagnétique dans ce système.

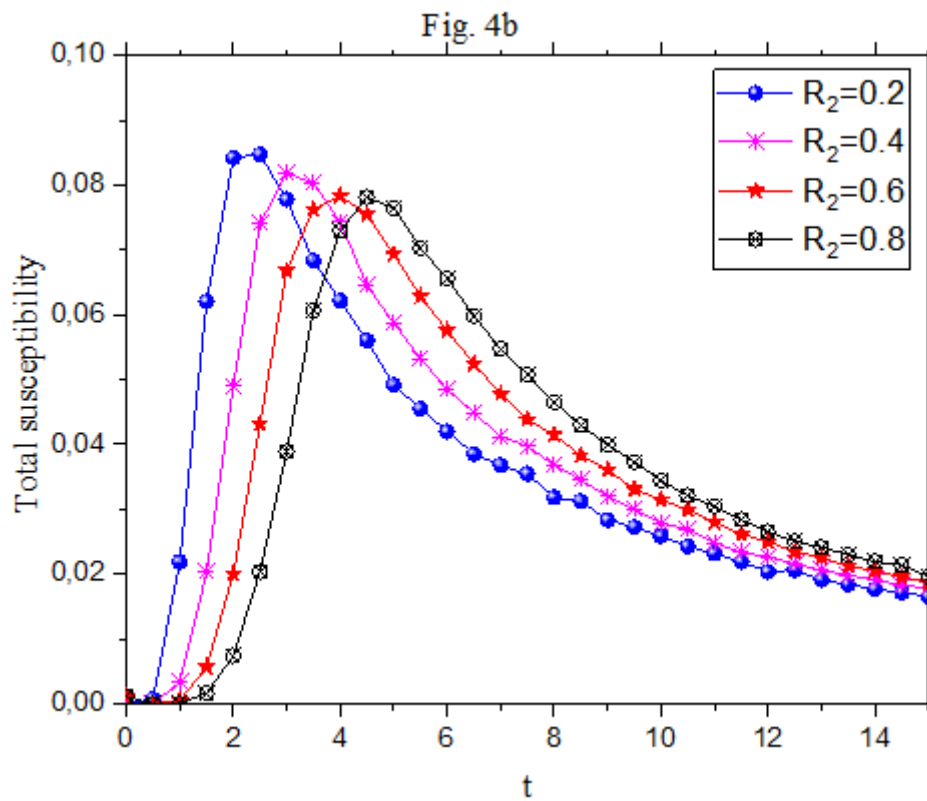
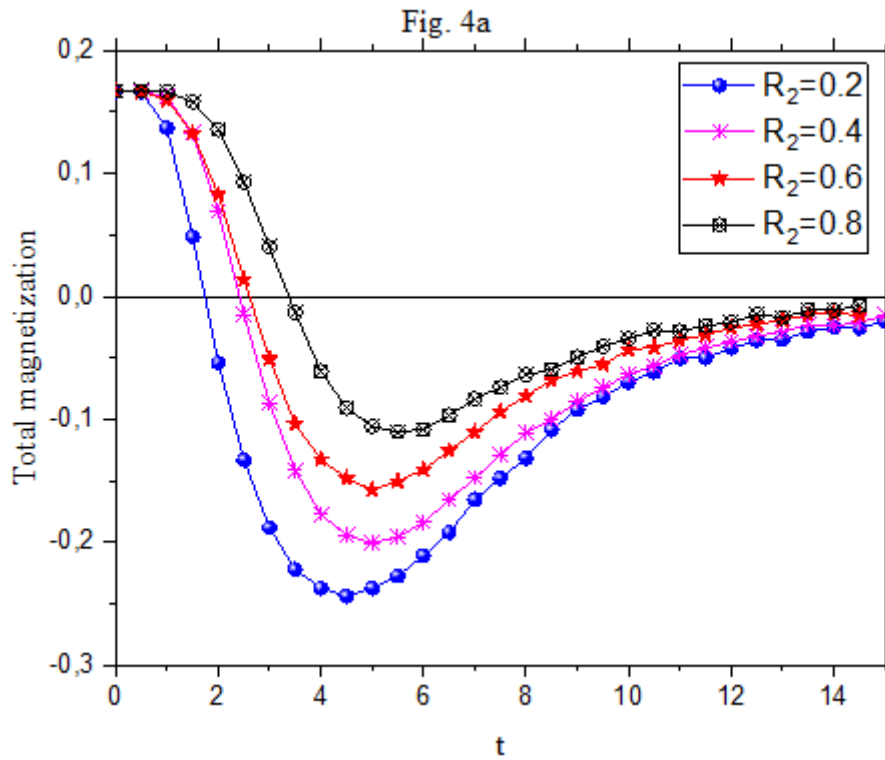


Figure V-4: Effets du paramètre de couplage R_2 sur l'aimantation et la susceptibilité totale en fonction de la température, pour $h=1$, et $\delta=0.02$. (a): Aimantation totale $R_1=-0.02$. (b): Susceptibilité magnétique totale.

V.3.2.3 Comportements de la température de compensation et de blocage

En utilisant la figure V-4(a), et la figure V-4(b), nous représentons la figure V-5 pour mieux comprendre simultanément le comportement de la compensation et de la température de blocage par rapport au paramètre R_2 . Il est clair que les deux courbes sont presque linéaires, parallèles et s'écartent lorsque la valeur du couplage est importante.

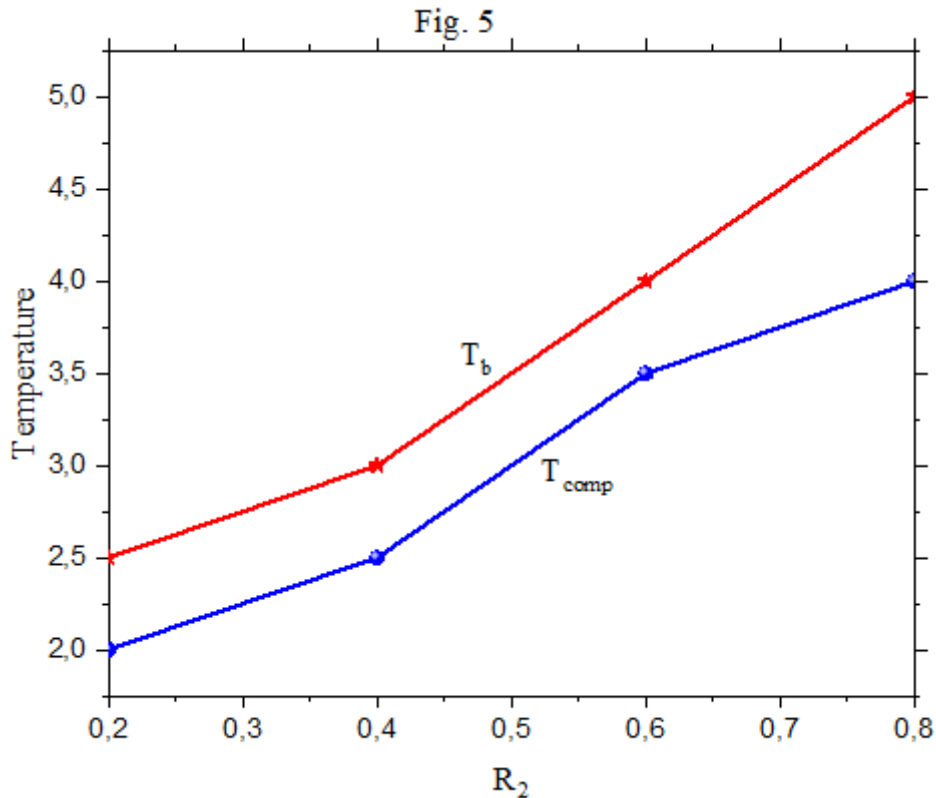


Figure V-5: Comportements de la température de compensation et de blocage pour $R_1 = -0.02$, $h=1$ et $\delta=0.02$

V.3.2.4 Effet du couplage d'échange ferrimagnétique sur l'aimantation totale

L'étude de l'effet de champ cristallin sur le comportement de l'aimantation totale, pour plusieurs valeurs du paramètre de couplage d'échange réduit R_2 , s'avère importante. En effet, la figure V-6(a) présente la variation de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin réduit δ lorsque R_2 prend les valeurs : 0,2, 0,4, 0,6 et 0,8, pour des paramètres réduits fixes : $R_1 = -0.02$, $t = 1$, et $h = 0$. Il est clair qu'aucun effet du paramètre R_2 n'a été constaté pour un champ cristallin réduit $\delta < -2.7$ et pour $\delta > -0.3$. Notons que lorsque $-2.7 < \delta < -0.3$, l'aimantation totale diminue pour atteindre sa valeur minimale puis augmente pour saturer. D'autre part, la figure V-6 (b) illustre la variation de l'aimantation totale en fonction du paramètre réduit R_2 . La valeur de l'aimantation totale augmente en augmentant la valeur du paramètre R_2 jusqu'à atteindre la

saturation pour toutes les courbes ($t = 0.2$ à $t = 1.0$). Remarquons également que toutes les courbes se chevauchent au point ($M_{\text{tot}} = -0.23$ et $R_2 = -0.23$) à partir duquel l'ordre est modifié.

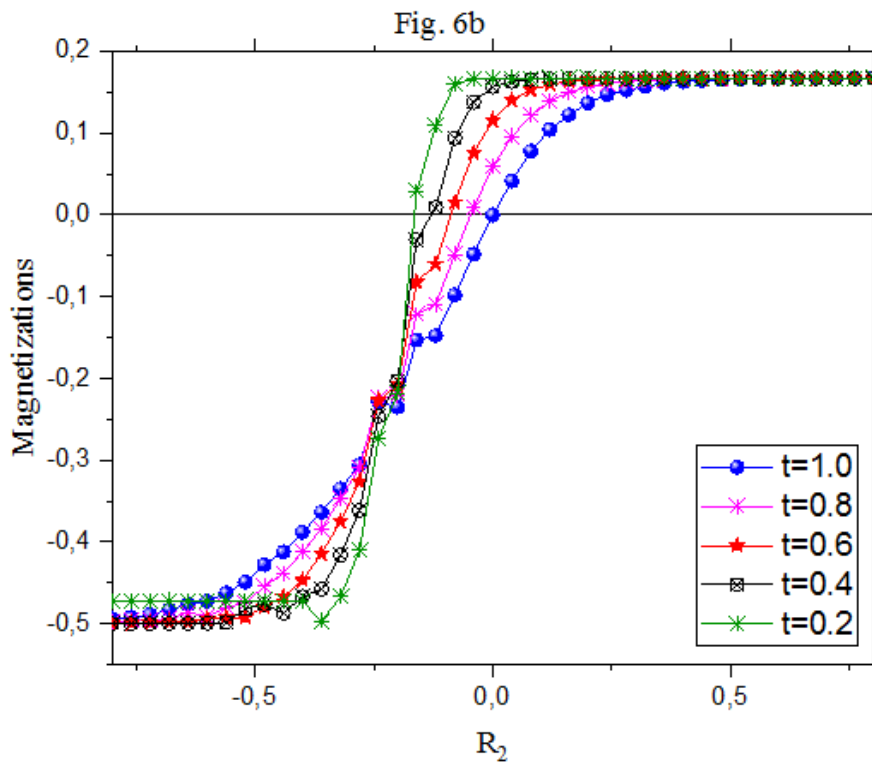
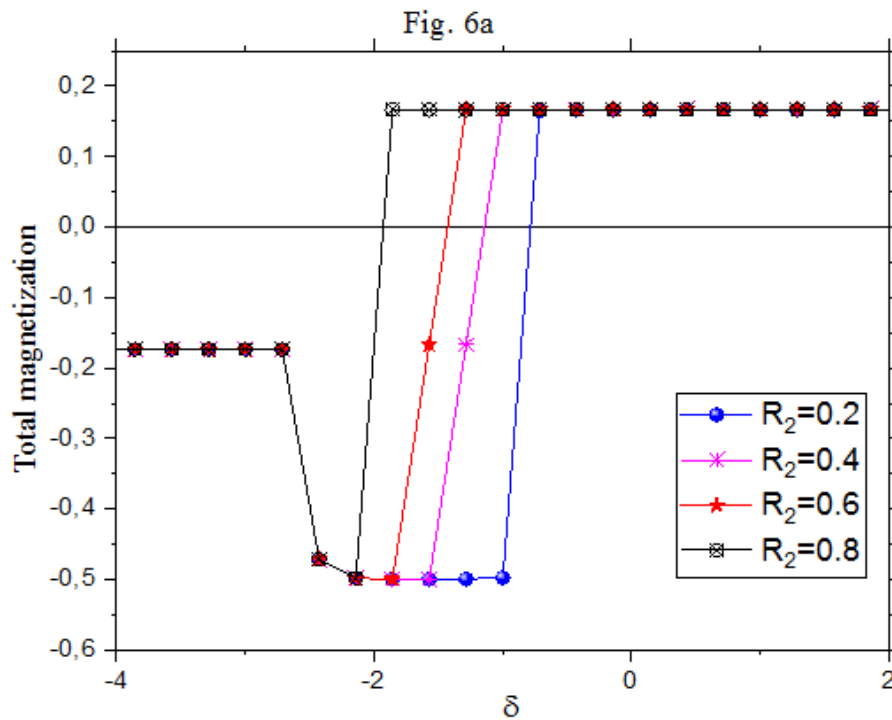
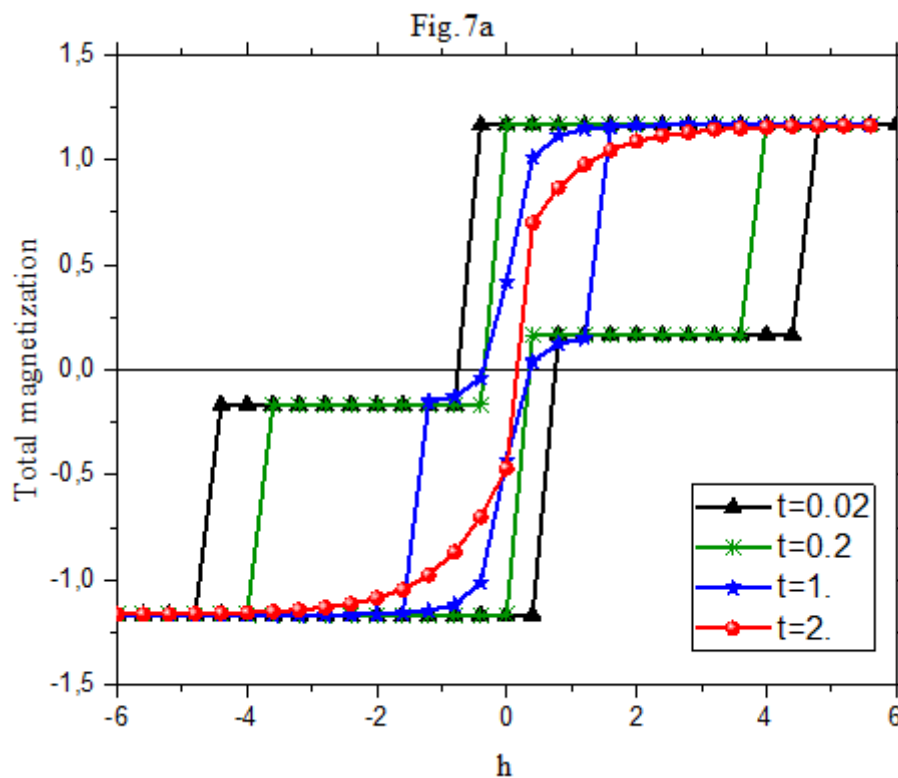


Figure V-6: Aimantation totale pour $h = 0$ et $R_1 = -0.02$: (a) en fonction du champ cristallin en faisant varier le couplage d'échange ferrimagnétique R_2 pour $t = 0.2$ et (b) en fonction du paramètre de couplage d'échange en faisant varier la température pour $R_2 = -0.2$ et $\delta = 0$.

V.3.2.5 Cycles d'hystérésis pour la structure de nano-dicoronylène

Dans la figure V-7(a) et la figure V-7(b), nous reportons l'effet de la température et de l'interaction de couplage d'échange sur le comportement d'hystérésis pour $R_1 = -0.02$, $h = 1$, et $\delta = 0.02$. Évidemment, sur la figure V-7(a), les courbes de l'aimantation sont symétriques par rapport à l'axe du champ magnétique externe ($h = 0$). Par ailleurs, il est clair que nous avons une boucle d'hystérésis lors de l'augmentation de la température, les valeurs du champ coercitif sont réduites et le système a tendance à fermer les boucles externes. De plus, les surfaces des boucles ont tendance à s'annuler lorsque la température s'approche de la valeur de la température de blocage.

Par ailleurs, pour $t > 2$, le système est dans sa phase paramagnétique. En addition, sur la figure V-7(b), nous remarquons que le champ magnétique coercitif diminue lors de l'augmentation de l'interaction de couplage d'échange R_2 . Notons également que la surface de la boucle d'hystérésis diminue lorsque la valeur du paramètre R_2 diminue. Nous expliquons que l'augmentation de l'interaction de couplage d'échange ferrimagnétique R_2 conduit à la conversion du système en phase désordonnée.



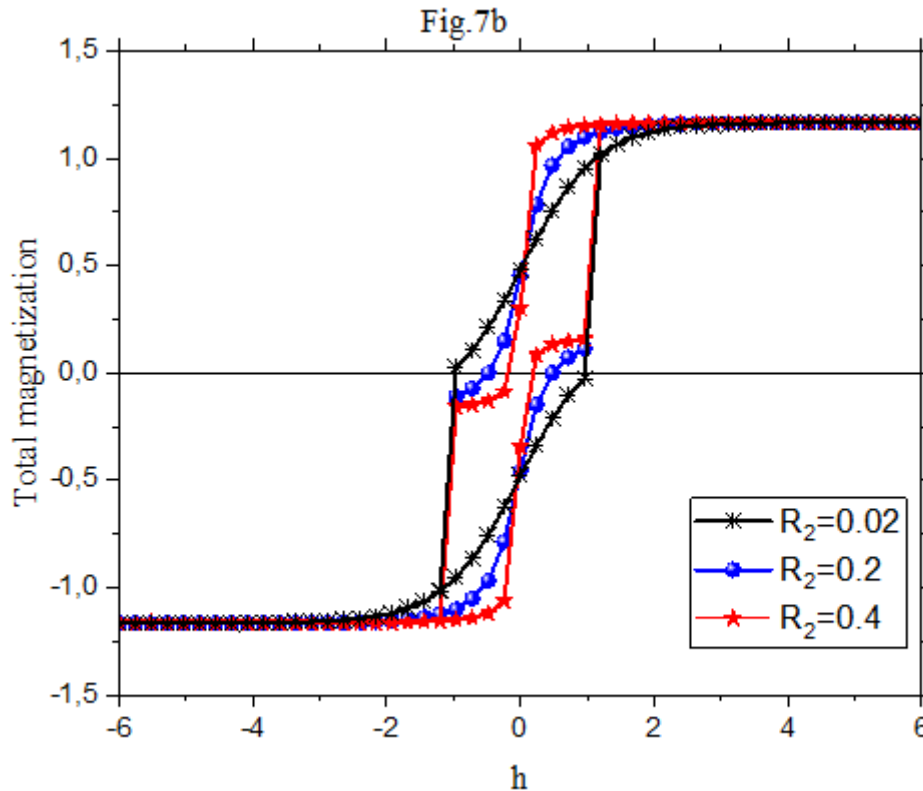


Figure V-7: Cycles d'hystérésis pour $R_1 = -0.02$ et $\delta = 0.02$. (a) en fonction de la température pour $R_2 = 0.2$. (b) en fonction du paramètre R_2 pour $t = 0.20$.

V.4 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à l'étude des diagrammes de phases et des propriétés magnétiques de la structure de type nano-dicoronylène à trois couches en considérant les spins mixtes $(3/2, 1)$ avec le modèle d'Ising de Blume-Capel. Les diagrammes de phases obtenus montrent les configurations stables du système. Le nombre de ces configurations dépend du plan considéré. Par ailleurs, les variations thermiques de l'aimantation totale et de la susceptibilité magnétique totale pour différentes valeurs des interactions de couplage d'échange et du champ magnétique externe ont été étudiées par la méthode de Monte Carlo. Nous avons montré que l'augmentation du paramètre R_2 conduit à une augmentation quasi-linéaire du point de compensation et une diminution de la surface du cycle d'hystérésis.

**CHAPITRE VI: EFFET DE LA DILUTION SUR LES
PROPRIETES MAGNETIQUES DU NANORESEAU DE
SPIN LIEB**

VI.1 Introduction

Dernièrement, la structure de nanoréseau de spin lieb, a attiré suffisamment l'attention de la communauté scientifique des points de vue théorique et expérimental [130,154,155]. Les chercheurs se sont intéressés à l'étude des propriétés physiques du nanoréseau de lieb 2D, en raison de leurs importantes propriétés magnétiques [156–158]. En général, le réseau de lieb, comme la majorité des nanomatériaux, peut être utile pour plusieurs applications technologiques avancées. En particulier, où la préoccupation principale est de minimiser autant que possible la taille et le poids des produits nanotechnologies. Un bon exemple est la mémoire d'ordinateur et les disques optiques [91–93,159–161]. Divers travaux et recherches ont été réalisés principalement pour étudier les propriétés physiques du nanoréseau de lieb. En utilisant la théorie de la réponse linéaire et l'approche de la fonction de Green. Yarmohammadi a étudié la dépendance en fréquence de la conductivité thermique du nanoréseau de lieb [162], dans le contexte du hamiltonien d'Heisenberg. Gouveia et Dias ont étudié les diagrammes de phases à champ moyen du modèle Hubbard bidimensionnel dans le nanoréseau de lieb, ils ont montré qu'en admettant le système pour moduler l'aimantation et la densité de charge entre plusieurs sous-réseaux, l'écart de l'aimantation des sous-réseaux est celle prédite par le nanoréseau de lieb [90]. Guzman et al. [163] ont analysé le transport de la lumière dans la masse et le bord des réseaux photoniques de lieb. Ils ont montré que le transport dans des réseaux de lieb en vrac est considérablement affecté par un site d'excitation particulier dans la cellule unitaire. Par ailleurs, Diebel et al [164] ont montré expérimentalement la dynamique des ondes dans un réseau photonique de lieb. D'autres travaux ont été consacrés aux transitions magnétiques de phases de l'état fondamental du nanoréseau de spin lieb [165] et le comportement de l'aimantation totale et de la susceptibilité magnétique lors de la variation des interactions d'échange et du champ cristallin

Dans un premier temps, nous étudions les propriétés magnétiques (aimantation et susceptibilité magnétique) du nanoréseau de spin de lieb à spin mixte décrit ci-dessus, en utilisant des simulations de Monte Carlo dans le cas pur (sans dilution). Nous discutons ensuite l'effet de la dilution sur l'aimantation totale, la susceptibilité magnétique totale et sur les cycles d'hystérésis magnétiques du système. À notre connaissance, aucune étude antérieure n'a été consacrée à l'effet de la dilution sur les propriétés magnétiques de la structure du nanoréseau de lieb.

VI.2 Théorie et modèle

Nous considérons la structure du nanoréseau de Lieb illustrée par la figure VI-1. Une telle structure a une maille élémentaire contenant trois atomes différents, avec des spins mixtes $S = 1/2$, $\sigma = 3/2$ et $q = 1$. Pour modéliser la présence d'une impureté non magnétique, les spins S et q sont dilués. L'Hamiltonien du système est donné par l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_{S\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_i S_i \sigma_j - J_{Sq} \sum_{\langle k,l \rangle} \varepsilon_k S_k \mu_l q_l - J_{\sigma q} \sum_{\langle m,n \rangle} \sigma_m \mu_n q_n \\ & - \Delta_\sigma \sum_j \sigma_j^2 - \Delta_q \sum_k (\mu_k q_k)^2 \\ & - H \left(\sum_i \varepsilon_i S_i + \sum_j \sigma_j + \sum_k \mu_k q_k \right) \end{aligned} \quad (\text{VI.1})$$

où les notations $\langle i, j \rangle$, $\langle k, l \rangle$ et $\langle m, n \rangle$ représentent les premiers sites voisins les plus proches. $J_{S\sigma}$, J_{Sq} et $J_{\sigma q}$ sont les paramètres d'interaction de couplage d'échange entre les spins (S - σ), (S - q) et (σ - q) respectivement. H est le champ magnétique externe. Δ_σ et Δ_q représentent les champs cristallins agissant respectivement sur les moments de spin σ et q . Pour simplifier, nous prenons $\Delta = \Delta_\sigma = \Delta_q$.

Les variables d'occupation ε_i et μ_k sont des variables aléatoires éteintes non corrélées prenant les valeurs $\varepsilon_i = \mu_k = 1$, avec une probabilité p (site magnétique occupé) ou $\varepsilon_i = \mu_k = 0$, avec une probabilité $1 - p$ (site non magnétique). Dans le cas particulier, lorsque la dilution ne concerne que les sites S , nous prendrons μ_k pour toutes les valeurs « k ». La probabilité p est égale à p_S lorsque seuls les sites de spin S sont dilués et égale à p_{Sq} lorsque les sites S et q sont dilués.

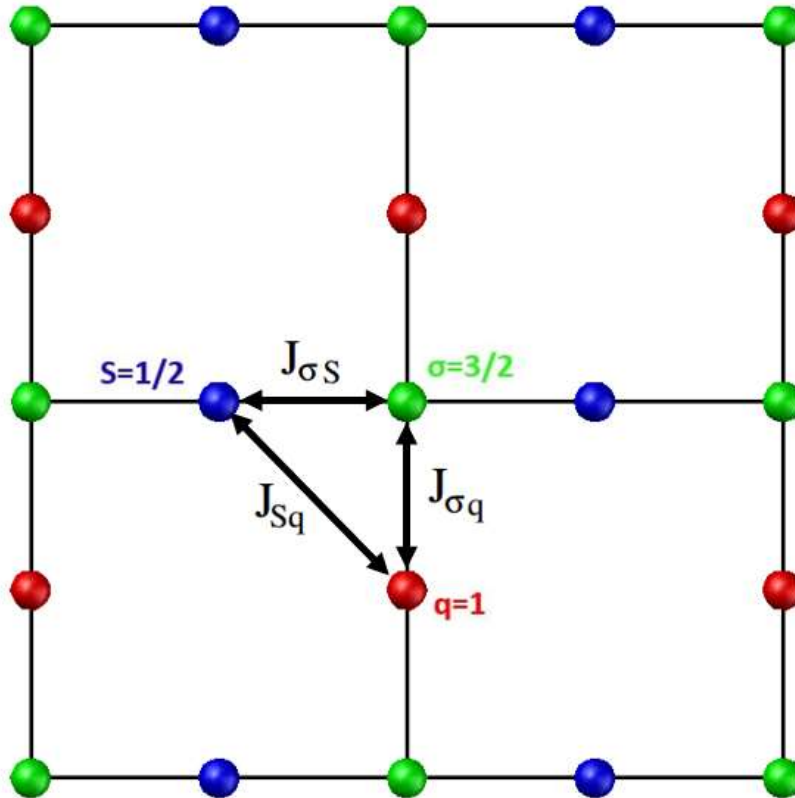


Figure VI-1: Représentation de la structure du nanoréseau de spin Lieb.

Pour le nanoréseau de spin Lieb étudié, nous rappelons que les nombres d'états sont respectivement $2S+1$, $2\sigma+1$ et $2q+1$. Par la suite, les configurations possibles sont : $(-1/2, 1/2)$ pour le spin S , $(-3/2, -1/2, 1/2, 3/2)$ pour le spin σ et $(-1, 0, 1)$ pour le spin q . Le nombre total de configurations possibles est alors donné par: $2 \times 4 \times 3 = 24$ configurations. Dans ce travail, nous ne nous intéresserons pas à l'étude de l'état fondamental, car, comme nous l'avons déjà noté en introduction, les diagrammes de phase de l'état fondamental pour le nanoréseau de Lieb de spin ont été établis en Réf. [15]. Pour simplifier les notations, nous utilisons les variables réduites : $R_{sq} = J_{sq}/J_{s\sigma}$, $R_{\sigma q} = J_{\sigma q}/J_{s\sigma}$, $h = H/J_{s\sigma}$, $t = T/J_{s\sigma}$ et $\delta = \Delta/J_{s\sigma}$.

L'étude de l'effet de la dilution sur les propriétés magnétiques de nanoréseau de spin Lieb est réalisée par la méthode Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis. Le nombre total de spins dans le système est $N_{\text{tot}} = (N_S + N_\sigma + N_q) = 65$, où $N_S = 20$, $N_\sigma = 25$ et $N_q = 20$. Le calcul sera basé sur l'Hamiltonien donné dans l'équation. (VI.1). Les aimantations du nanoréseau de spin Lieb sont données comme suit :

$$M_S = \frac{1}{N_s} \sum_i \varepsilon_i S_i \quad (\text{VI.2})$$

$$M_\sigma = \frac{1}{N_\sigma} \sum_j \sigma_j \quad (\text{VI.3})$$

$$M_q = \frac{1}{N_q} \sum_k \mu_k Q_k \quad (\text{VI.4})$$

L'aimantation totale est exprimée comme suit :

$$M_{\text{tot}} = \frac{p_s N_s M_S + N_q M_q + N_\sigma M_\sigma}{p_s N_s + N_q + N_\sigma} \quad (\text{VI.5})$$

$$M'_{\text{tot}} = \frac{p_{sq} (N_s M_S + N_q M_q) + N_\sigma M_\sigma}{p_{sq} (N_s + N_q) + N_\sigma} \quad (\text{VI.6})$$

L'équation (VI.5) est valable lorsque nous diluons uniquement les spins S avec une probabilité p_s , tandis que l'équation (VI.6) correspond au cas où les deux sites S et σ sont dilués par la probabilité p_{sq} .

Les susceptibilités magnétiques du système étudié sont données par :

$$\chi_s = \beta (\langle M_s^2 \rangle - \langle M_s \rangle^2) \quad (\text{VI.7})$$

$$\chi_\sigma = \beta (\langle M_\sigma^2 \rangle - \langle M_\sigma \rangle^2) \quad (\text{VI.8})$$

$$\chi_q = \beta (\langle M_q^2 \rangle - \langle M_q \rangle^2) \quad (\text{VI.9})$$

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

Les susceptibilités magnétiques totales sont données par les équations suivantes :

$$\chi_{\text{tot}} = \frac{p_s N_s \chi_s + N_q \chi_q + N_\sigma \chi_\sigma}{p_s N_s + N_q + N_\sigma} \quad (\text{VI.10})$$

$$\chi'_{\text{tot}} = \frac{p_{\text{sq}}(N_s\chi_s + N_q\chi_q) + N_\sigma\chi_\sigma}{p_{\text{sq}}(N_s + N_q) + N_\sigma} \quad (\text{VI.11})$$

Les mêmes considérations données précédemment dans les équations (VI.5) et (VI.6) sont toujours valables pour les équations (VI.10) et (VI.11).

VI.3 Résultats et discussion.

VI.3.1 Résultats de la simulation par la méthode Monte Carlo

Dans cette section nous présentons les résultats obtenus par la méthode Monte Carlo pour le nano réseau de spin Lieb avec des spins mixtes $S= 1/2$, $\sigma= 3/2$ et $q=1$.

VI.3.1.1 Aimantations et susceptibilités totales et partielles en fonction de la température sans dilution

Les figures VI-2(a) et VI-2(b) montrent le comportement total et partiel des aimantations et des susceptibilités magnétiques, pour le cas pur, en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe. Ces deux figures ont été tracées pour des valeurs fixes de $R_{\text{sq}} = 1$, $R_{\sigma q} = 0.5$ et $p_s = p_{\text{sq}} = 1$.

Dans le cas pur ($p_s = p_{\text{sq}} = 1$), l'aimantation est calculée par l'équation (VI.5) ou (VI.6). Par exemple, vers les très basses températures ; $M_{\text{tot}} = (25 \times 1.5 + 20 \times 1 + 20 \times 0.5) / 65 = 1.04$, $M_\sigma = 1.5$, $M_S = 0.5$ et $M_q = 1$. À partir de ces valeurs, les aimantations totales et partielles diminuent lorsque la température augmente, comme illustré sur la figure VI-2(a). Cela est dû à une vibration plus forte des atomes magnétiques à des températures plus élevées conduisant à une phase paramagnétique. En effet, la transition de l'état ferromagnétique à la phase paramagnétique est caractérisée par un pic des susceptibilités magnétiques partielles et totales en fonction de la température comme l'indique la figure VI-2(b). La température de transition est la même pour chaque nano-sous-réseau et est égale à $t_c = 1.67$.

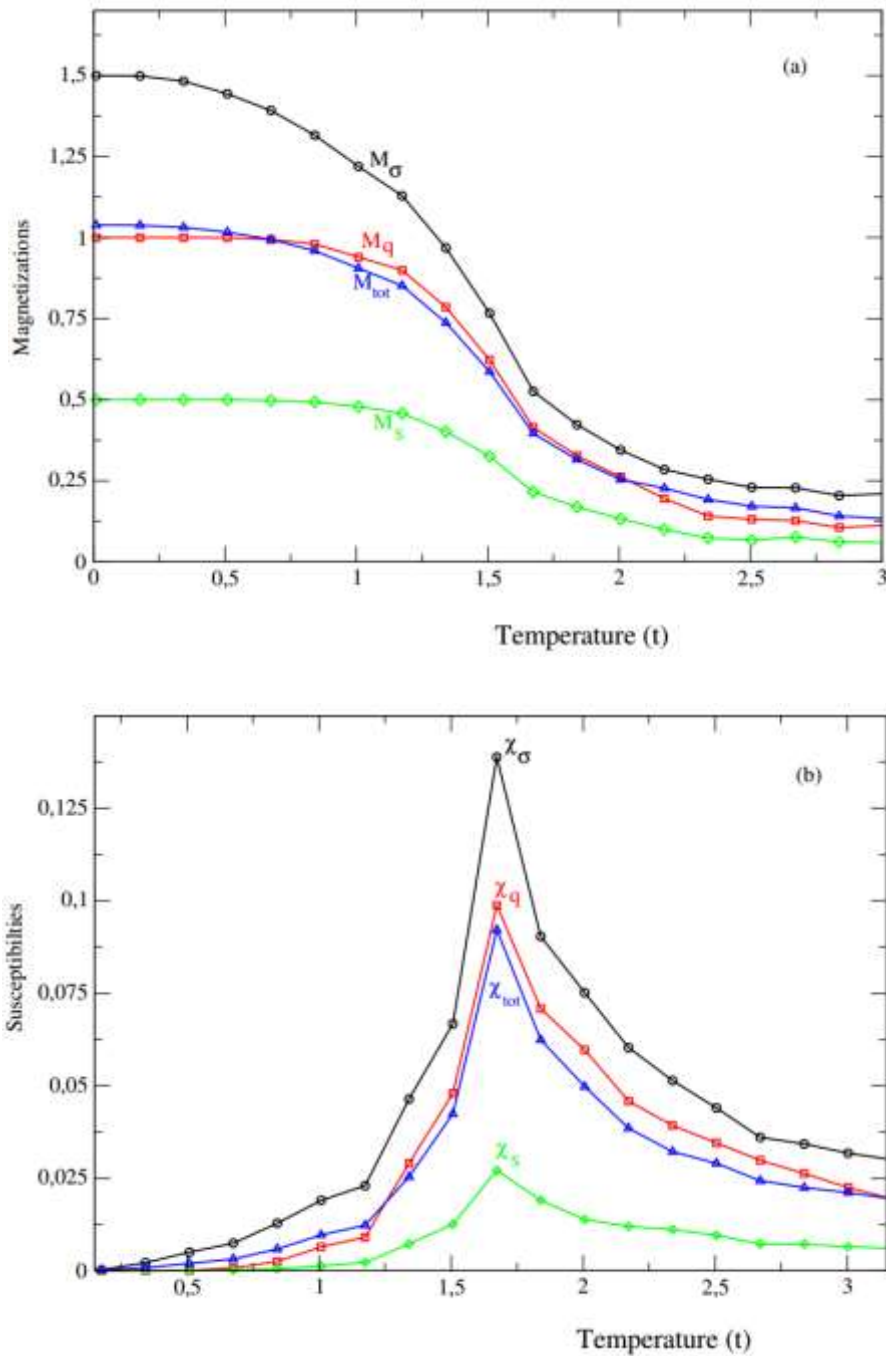
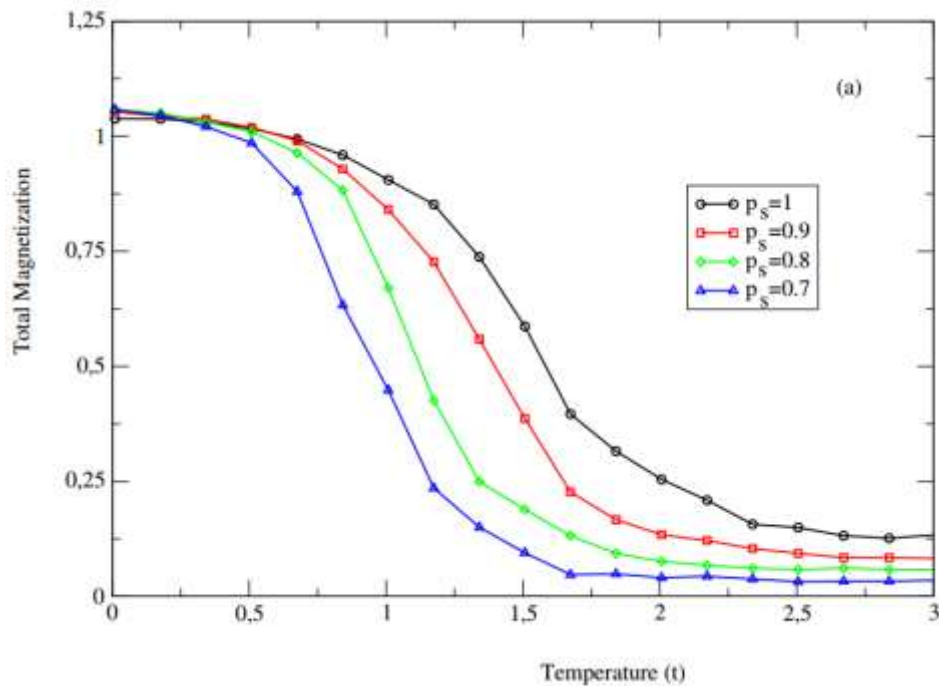


Figure VI-2: Variation de l'aimantation et de la susceptibilité dans la structure du nanoréseau de Lieb (a) Aimantations totale et partielles en fonction de la température dans le cas pur, pour $R_{sq} = 1$, $R_{\sigma q} = 0.5$. (b) Susceptibilité magnétique en fonction de la température, pour $R_{s\sigma} = 1$, $R_{sq} = 1$, $R_{\sigma q} = 0.5$.

VI.3.1.2 Aimantation et susceptibilité totale en fonction de la température pour plusieurs valeurs de la probabilité de dilution d'un seul type de spin

Nous étudions ici l'effet de la dilution sur le comportement de l'aimantation totale et sur la susceptibilité magnétique totale. Nous commençons d'abord par diluer un seul type de spin. En effet, nous ne diluons au hasard que les spins S avec la probabilité p_s . Ensuite, les spins S et

q sont dilués avec une probabilité p_{sq} . La figure VI-3(a) présente l'aimantation totale en fonction de la température pour plusieurs valeurs de la probabilité p_s , dans le cas où $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$, en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe. Cette figure montre que l'aimantation totale diminue lors de la diminution de la probabilité de dilution. Alors que la figure VI-3(b) illustre la variation de la susceptibilité magnétique totale en fonction de la température lorsque la probabilité p_s prend des valeurs entre 1 et 0.7. Évidemment, la température de transition diminue en diminuant la probabilité p_s . En effet, lorsque nous diminuons la probabilité de dilution, le nombre d'atomes non magnétiques augmente, d'où l'aimantation totale et la température de transition diminuent également. Les comportements des aimantations totale et partielles, dans le cas pur, peut être comparé à ceux obtenus dans la réf. [15]



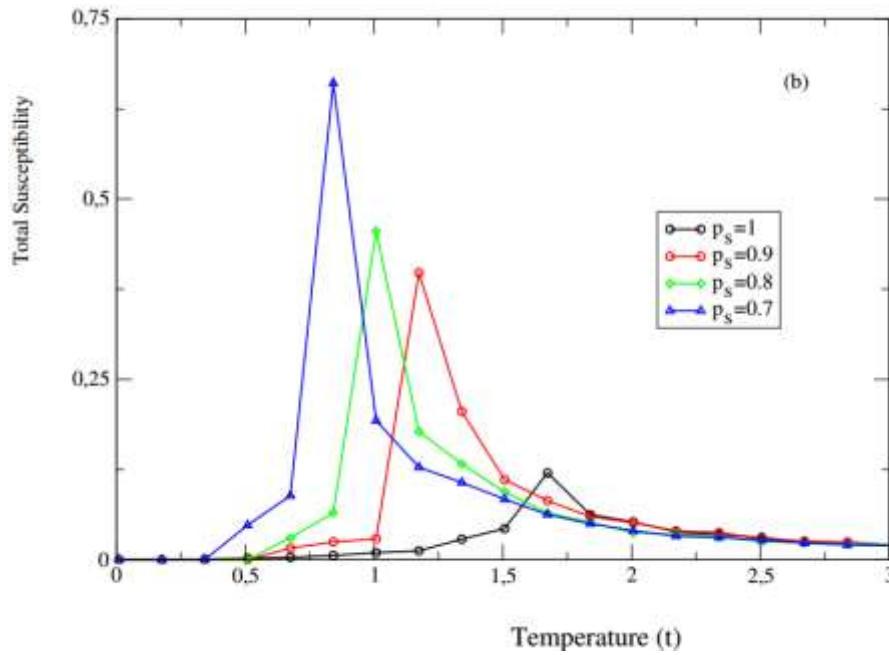


Figure VI-3: Variation de l'aimantation et de la susceptibilité dans la structure du nanoréseau de Lieb. (a) Aimantation totale. (b) Susceptibilité totale en fonction de la température pour plusieurs valeurs de la probabilité de dilution p_s avec $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$.

VI.3.1.3 Aimantation et susceptibilité totales en fonction de la température pour plusieurs valeurs de la probabilité de dilution de deux types de spins

Pour étudier l'effet des probabilités de dilution des spins S et q , les figures VI-4(a) et VI-4(b) présentent respectivement l'aimantation totale et la susceptibilité magnétique totale en fonction de la température réduite pour deux valeurs de p_s et p_{sq} (0.90 et 0.70). Ces figures ont été établies dans le cas où $R_{sq} = 1$, $R_{\sigma q} = 0.5$ et en l'absence du champ cristallin et du champ magnétique externe. Il est évident que la température de transition diminue lorsque nous augmentons le nombre de sites non magnétiques. Cette diminution de la température de transition est importante lorsque p_s et p_{sq} diminuent.

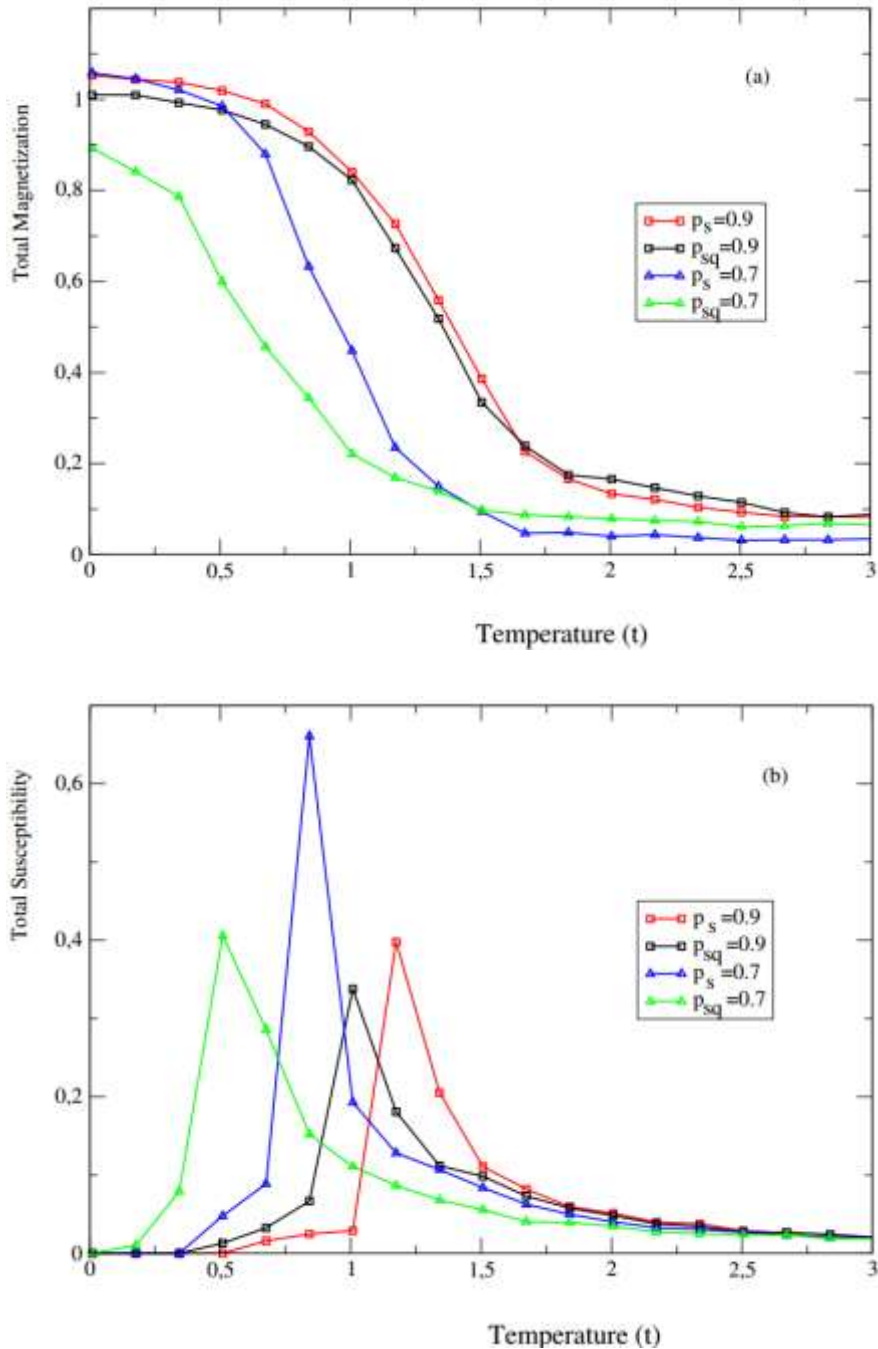


Figure VI-4: Variation de l'aimantation et de la susceptibilité dans la structure du nanoréseau de Lieb (a) Aimantation totale avec dilution. (b) Susceptibilité totale en fonction de la température avec la dilution des spins S et q, pour deux valeurs de p_s et p_{sq} (0.7 et 0.9), $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$.

VI.3.1.4 Aimantation totale en fonction du champ cristallin avec dilution

Nous étudions le comportement de l'aimantation totale et de la susceptibilité magnétique par rapport au champ cristallin δ lorsque les spins S et q sont dilués. En effet, les figures VI-5(a) et VI-5(b) indiquent respectivement le comportement de l'aimantation totale par rapport au champ cristallin lors de la variation de p_s et p_{sq} . Ces figures sont obtenues en l'absence du champ magnétique externe, à basse température ($t = 0.1$), pour $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$. La figure VI-5(a)

montre une augmentation de l'aimantation totale en fonction du champ cristallin lorsque p_s prend les valeurs 0.7 et 0.8 et une diminution lorsque p_s est égal à 1 ou 0.9. Le même comportement apparaît sur la figure VI-5(b) lors de la variation de p_{sq} avec un effet accentué de la dilution. En comparant les deux figures, nous concluons que l'effet de la dilution de p_{sq} est significatif que celui du p_s lorsqu'elle est effectuée sur les deux spins simultanément.

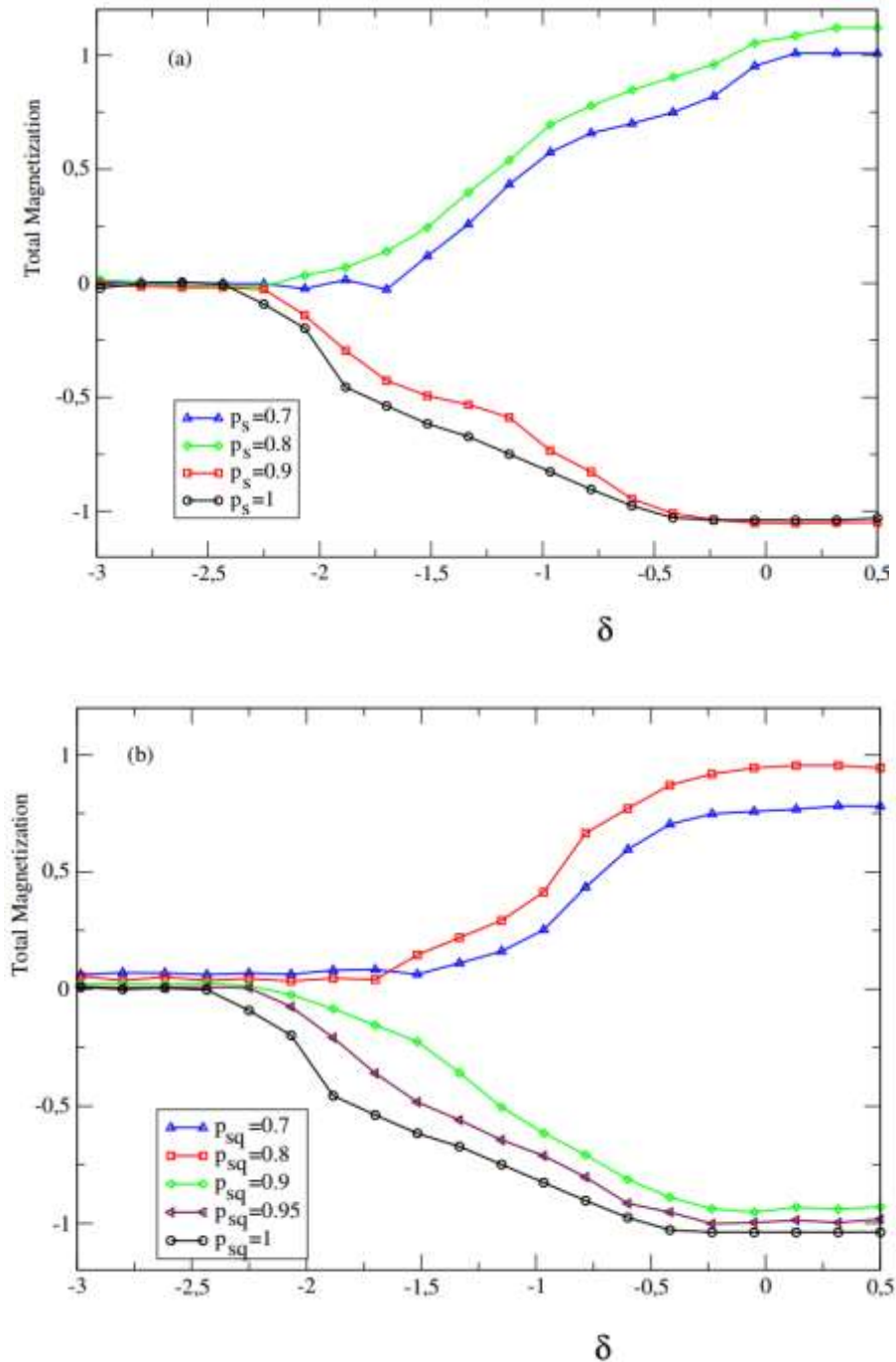


Figure VI-5: Aimantation totale en fonction du champ cristallin magnétique avec la dilution du spin S (a) avec la dilution des deux spins S et q (b), avec $R_{sq} = 1$ et $R_{sq} = 0.5$.

VI.3.1.5 Cycles d'hystérésis magnétique du nanoréseau de spin Lieb

Enfin, les cycles d'hystérésis magnétique pour le nanoréseau de spin Lieb sont illustrés sur la figure VI-6(a), à basse température ($t = 0.1$), pour $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$. Cette figure est donnée en l'absence du champ cristallin. Elle présente l'effet de la probabilité de dilution p_s . Nous constatons qu'une augmentation d'un type d'atomes non magnétiques (p_s diminue de 1 à 0.8) entraîne une diminution des surfaces des boucles. En effet, l'augmentation de la concentration des atomes non magnétiques entraîne une diminution des surfaces des boucles. La figure VI-6(b) présente l'effet de la probabilité de dilution p_{sq} , cette figure confirme le même comportement obtenu sur la figure VI-6(a).

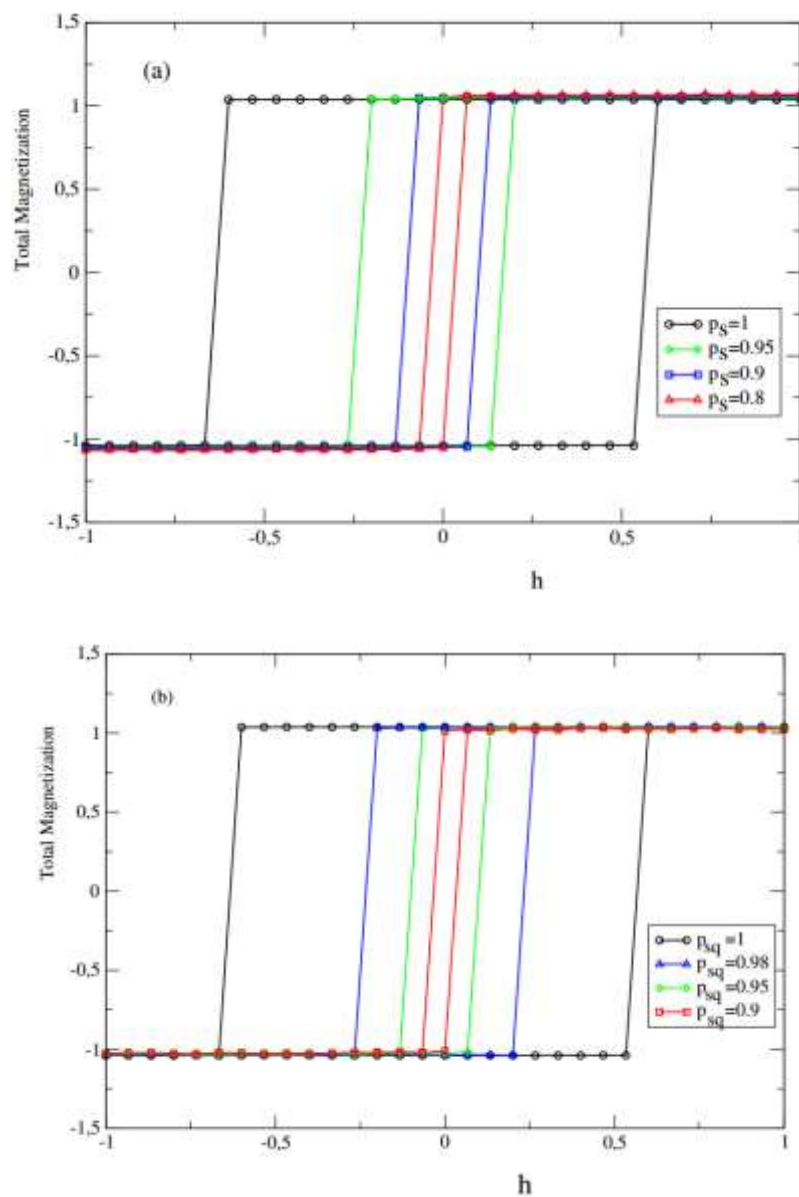


Figure VI-6: Cycle d'hystérésis magnétique pour différentes valeurs de p_s à basse température $t = 0,1$ (a) et pour plusieurs valeurs de p_{sq} (b), avec $R_{sq} = 1$ et $R_{\sigma q} = 0.5$.

VI.3.1.6 Effet de la dilution sur le champ magnétique coercitif

A partir des cycles d'hystérésis étudiés, nous collectons les différentes valeurs du champ coercitif pour obtenir la figure VI-7. Cette figure montre le comportement du champ coercitif avec les probabilités p_s et p_{sq} . Nous remarquons que le champ coercitif diminue en diminuant les probabilités p_s et p_{sq} de 1 à 0.8. La différence entre les courbes de la figure VI-7 peut facilement être expliquée par le fait que le nombre d'atomes non magnétiques est plus élevé lorsque les sites S et q sont dilués.

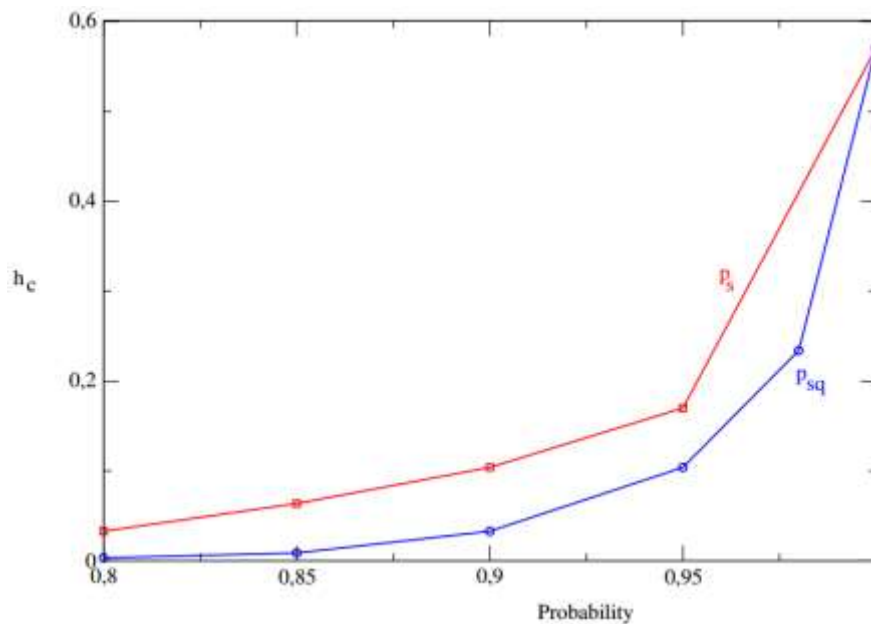


Figure VI-7: Champ magnétique coercitif en fonction de la probabilité p_s et p_{sq} , pour $R_{sq} = 1$, $R_{\sigma q} = 0.5$ et $t = 0.1$.

VI.4 Conclusion

Ce chapitre concerne l'application de la méthode de Monte Carlo pour un nanoréseau de spin Lieb avec trois types de spins mixtes $S = 1/2$, $\sigma = 3/2$ et $q = 1$. Nous avons étudié les variations de l'aimantation totale et de la susceptibilité magnétique totale en fonction de la température, le champ cristallin et le champ magnétique externe. En outre, nous avons établi les cycles d'hystérésis magnétiques de la structure étudiée pour différentes valeurs du champ cristallin et pour différentes valeurs de la dilution. Les résultats obtenus mettent en évidence que la dilution p_s et /ou p_{sq} diminue significativement l'aimantation et la température de transition. De plus, le champ coercitif diminue avec la diminution des probabilités p_s et p_{sq} .

Conclusion générale et perspectives

Dans ce travail de recherche, nous avons utilisé la méthode de Monte Carlo sous l'algorithme de Metropolis pour étudier les propriétés magnétiques des nanostructures de type graphène en nid d'abeille, borophène, nano-dicoronylène, et nanoréseau de spin lieb. Nous avons présenté et discuté l'effet des paramètres de couplages et de la dilution sur le comportement de la température de compensation et sur les propriétés magnétiques de ces nano-systèmes. Les principales conclusions de ce travail sont les suivantes :

Pour le nanoréseau en nid d'abeilles, l'étude des digrammes de phases nous a permis de montrer la présence de 16 configurations stables dans le plan (h, δ) parmi les 24 configurations possibles, tandis que seulement 6 configurations stables sont présentes dans le plan $(R_{SS}, R_{S\sigma})$. Les simulations, par la méthode de Monte Carlo, ont mis en évidence l'existence d'une température de compensation. Cette dernière apparaît pour des valeurs spécifiques des paramètres de couplage d'échange. En outre, les résultats obtenus montrent que la concentration de dilution a un effet considérable sur les valeurs de la température de compensation. Par contre, pour les cycles d'hystérésis, l'effet de la dilution sur le comportement de l'aimantation est très faible.

En ce qui concerne le système composé de deux couches étendues de structure borophène, l'étude des aimantations partielles et totales indique qu'à très basse température, les aimantations partielles sont en bon accord avec les valeurs des diagrammes de phase de l'état fondamental. Nous avons montré que le comportement de la chaleur spécifique est presque similaire au comportement de la susceptibilité. La courbe de la chaleur spécifique augmente avec l'augmentation de la température jusqu'au point de saturation puis diminue jusqu'à une valeur proche de zéro. Nous avons montré aussi qu'il y a une augmentation presque linéaire de la température critique et une diminution de la courbe du champ cristallin lorsque les valeurs des deux paramètres de couplage $(R_1 \text{ et } |R_2|)$ augmentent.

L'étude de l'effet de la dilution sur les propriétés magnétiques dans la structure de borophène bicouches, nous a permis de montrer que la probabilité de dilution affecte fortement le comportement thermique des aimantations et des susceptibilités totales et partielles. Nous avons aussi constaté que la diminution des deux probabilités de dilution P_σ et P_s entraîne la diminution des paramètres spécifiques des cycles d'hystérésis.

Pour la structure de type nano-dicoronylène à trois couches, nous avons montré que les douze configurations stables possibles n'apparaissent pas toutes dans le même plan. Nous avons montré l'existence d'une température de compensation correspondant à une phase super-paramagnétique. L'augmentation du paramètre de couplage R_2 conduit à une augmentation quasi-linéaire de cette température et à une diminution de la courbe du champ cristallin. De plus, l'étude des cycles d'hystérésis a montré que les valeurs du champ coercitif sont réduites et le système a tendance à fermer les boucles externes et les surfaces des boucles ont tendance à s'annuler lorsque la température s'approche de la valeur de température de blocage.

En ce qui concerne la structure du nanoréseau de spin lieb pour trois sous-réseaux avec des spins de valeurs différentes, nous avons montré que lorsque la probabilité de dilution diminue, l'aimantation totale et la température de transition diminuent. Nous avons montré également que l'aimantation totale augmente en fonction du champ cristallin lorsque p_s prend les valeurs 0,7 et 0,8 et diminue lorsque p_s est égal à 1 ou 0,9. En plus, nous avons mis en exergue que la présence de dilution p_s et/ou p_q (des sites S et q) diminue significativement l'aimantation et le champ coercitif.

Nous envisageons dans l'avenir :

- Compléter la présente étude par l'analyse de l'effet de la taille sur le comportement des propriétés magnétiques des systèmes cités ci-dessus.
- Etudier d'autres propriétés magnétiques et thermodynamiques de nano-systèmes tels que la chaleur spécifique, et le paramètre binder cumulant.
- Mener une étude théorique comparative et de simulation, par la méthode Monte Carlo et par DFT, des propriétés magnétiques et thermodynamiques sur des nano-systèmes étudiés expérimentalement par la communauté scientifique.

ANNEXES

ANNEXE 1 : TYPES D'INTERACTIONS D'ÉCHANGE MAGNETIQUE

✚ Interactions d'échanges magnétiques :

Les interactions d'échange sont les couplages responsables de l'ordre magnétique en dessous de la température critique dans un matériau magnétique. De telles interactions entrent directement en concurrence avec l'agitation thermique. Au-dessus de la température critique T_c , l'effet de la température devient plus important que tout ordre imposé par l'effet de ces interactions et donc l'ordre magnétique est perdu (état paramagnétique) [19,139]. Les interactions d'échange existent dans différents mécanismes selon le matériau considéré par exemple ; les interactions au sein des métaux diffèrent de celles des isolants etc. Dans le cas des matériaux paramagnétiques, un tel ordre est provoqué par un champ magnétique externe. Par conséquent, il est raisonnable de supposer qu'à l'intérieur d'un matériau ferromagnétique, un champ magnétique interne est produit, appelé le champ d'échange, qui oriente les moments magnétiques permanents existants. L'origine du champ effectif est l'interaction d'échange, généralement sur des atomes voisins, agissant en conjonction avec le principe de Pauli, qui interdit aux deux électrons d'entrer dans le même état quantique [166]. Les électrons ne peuvent pas être au même endroit s'ils ont le même spin. Lorsque les spins des atomes voisins ont une direction différente, cela donne une différence d'énergie. Le mécanisme d'échange dans les métaux ferromagnétiques et antiferromagnétiques implique le chevauchement des orbitales atomiques partiellement localisées d'atomes adjacents.

L'énergie magnétique est divisée en différentes contributions telles que l'énergie d'échange $E_{\text{échange}}$, l'énergie d'interaction dipolaire E_{dip} , l'énergie anisotrope E_a et l'énergie Zeeman E_z associées à un champ magnétique externe appliqué. Ainsi, globalement, l'énergie totale E_{tot} peut s'écrire :

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{échange}} + E_{\text{dip}} + E_a + E_z \quad (\text{A1.1})$$

✚ Interactions RKKY :

L'interaction RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya, Yosida) [167], se produit dans les métaux avec des moments magnétiques localisés. Dans les interactions RKKY, un spin local polarise l'électron de la surface de Fermi et cette surface polarisée interagit avec un autre spin local donnant une interaction à longue portée suivant une loi de puissance r^{-2} et oscille avec un

vecteur d'onde qui est fondamentalement un vecteur d'onde de Fermi. Bien entendu, cette interaction dépend des détails de la surface de Fermi qui n'est pas nécessairement simple et donc du matériau considéré [149,168].

✚ Interactions super échange :

Le super échange ou l'interaction de super échange de Kramers-Anderson [169] est une autre forme d'interaction d'échange indirecte qui est dominante dans les isolants, en particulier dans les oxydes de métaux de transition. Il décrit l'interaction entre des cations magnétiques de la même charge qui sont éloignés les uns des autres pour être connectés par une interaction d'échange direct mais couplés sur une plus grande distance à travers un anion non magnétique. Soit \vec{S}_i et \vec{S}_j les spins de deux atomes magnétiques voisins i et j , alors l'énergie d'échange peut s'exprimer comme suit :

$$E_{\text{échange}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{A1.2})$$

Avec J_{ij} représente l'interaction d'échange entre les spins en interaction \vec{S}_i et \vec{S}_j . $J_{ij} > 0$ indique une interaction ferromagnétique, qui tend à aligner les spins parallèles ; $J_{ij} < 0$ indique une interaction antiferromagnétique, qui tend à aligner les spins antiparallèles.

✚ Interaction d'échange Dzyaloshinskii-Moriya :

Certains matériaux antiferromagnétiques possèdent une symétrie d'abaissement (rupture de symétrie d'inversion) résultant d'un ordre magnétique incliné en dessous de T_N . Une telle rupture de symétrie conduit à un type supplémentaire d'interaction d'échange appelé interaction Dzyaloshinskii-Moriya (DM) ou interaction d'échange antisymétrique [170]. Cette interaction antisymétrique DM est la correction relativiste des interactions de super-échange habituelles et sa force est proportionnelle au couplage spin-orbite. La contribution énergétique de cette interaction peut être exprimée par :

$$E_{DM} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) \quad (\text{A1.3})$$

$\vec{D}_{ij} = \vec{r}_{ij} \times \vec{u}$ est le vecteur d'interaction DM. L'énergie est minimisée lorsque \vec{S}_i est perpendiculaire à \vec{S}_j dans un plan perpendiculaire à \vec{D}_{ij} . Ainsi, cette interaction d'échange antisymétrique favorise les structures de spin inclinées. Une telle interaction est importante pour comprendre le mécanisme de la polarisation électrique.

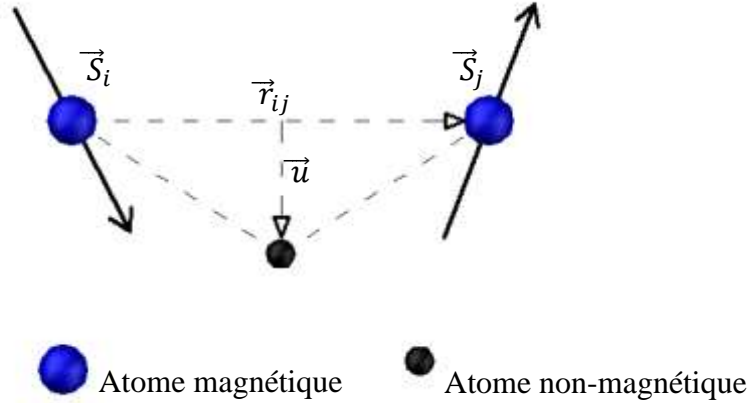


Figure A1-1: Illustration de l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya

Interaction d'échange biquadratique

Il s'agit d'un autre type d'interaction d'échange indirect qui existe généralement dans les terres rares telle que scandium, l'yttrium et les quinze lanthanides. Ce type d'interaction est considéré comme un terme de correction à l'interaction de super-échange lors de l'extension des calculs de Kramers [171] de la théorie de la perturbation du troisième au cinquième ordre comme proposé par Anderson [169,172]. Sa contribution énergétique peut être représentée par :

$$E_{biq} = -\beta \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \vec{S}_j)^2 \quad (\text{A1.4})$$

Interaction dipolaire

Nous considérons deux moments magnétiques \vec{m}_i et \vec{m}_j séparés par une distance r_{ij} comme il est indiqué sur la figure A1-2, l'expression de l'énergie est donnée par l'équation :

$$E_{ij} = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left(\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - \frac{3}{r_{ij}^3} (\vec{m}_i \cdot r_{ij})(\vec{m}_j \cdot r_{ij}) \right) \quad (\text{A1.5})$$

Une telle paire d'énergie est minimisée lorsque \vec{m}_i et \vec{m}_j sont alignés parallèlement l'un à l'autre le long de la direction de r_{ij} . Cependant, pour un ensemble de dipôles magnétiques, l'interaction dipolaire induit une frustration dans le système car il n'est pas possible de satisfaire toutes les paires d'énergie.

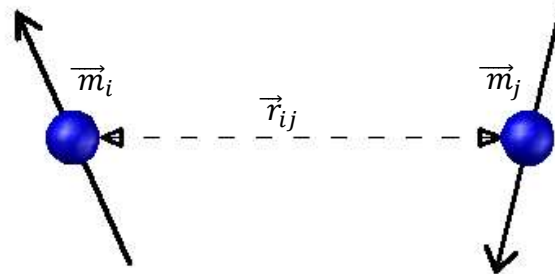


Figure A1-2 : Représentation de l'interaction dipolaire entre deux dipôles magnétiques séparés par une distance r_{ij} .

✚ Anisotropie magnéto-cristalline :

L'anisotropie magnéto-cristalline résulte du couplage spin-orbite et de l'interaction du champ cristallin [173]. L'une des formes de l'anisotropie magnéto-cristalline est l'anisotropie mono-ionique. La contribution d'un seul ion est essentiellement due à l'interaction électrostatique de l'état orbital d'un ion magnétique et du champ cristallin environnant qui est très fort. L'interaction du champ cristallin tend à stabiliser des orbitales particulières et est transférée aux moments de spin via le couplage spin-orbite qui tend à aligner les moments magnétiques le long d'une direction cristallographique particulière. Pour un cristal uni-axial avec une anisotropie d'axe facile le long de la direction z (ou la direction c), l'énergie anisotrope ionique est définie par l'équation :

$$E_a = -D_z \sum_i S_z^2 \quad (\text{A1.6})$$

avec D_z est la constante d'anisotropie des ions simples.

L'anisotropie magnéto-cristalline a une grande influence sur les utilisations industrielles des matériaux ferromagnétiques. Les matériaux à forte anisotropie magnéto-cristalline ont généralement une coercivité élevée ; c'est-à-dire qu'ils sont difficiles à démagnétiser. Ceux-ci sont utilisés pour fabriquer des aimants permanents. L'anisotropie mono-ionique est la principale source d'anisotropie magnéto-cristalline dans les matériaux ferromagnétiques durs.

D'un autre côté, les matériaux à faible anisotropie magnéto-cristalline ont généralement une faible coercivité, et donc leur aimantation peut être facilement modifiée [174].

ANNEXE 2 : Formules de calcul des propriétés magnétiques

✚ Cas pur (absence des impuretés dans le système) :

Aimantation

$$m_S = \frac{1}{N_S} \sum_i S_i \quad (\text{A2.1})$$

Susceptibilité

$$\chi_S = \beta(\langle m_S^2 \rangle - \langle m_S \rangle^2) \quad (\text{A2.2})$$

Chaleur spécifique

$$C_V = \frac{\beta^2}{N_{tot}} [\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2] \quad (\text{A2.3})$$

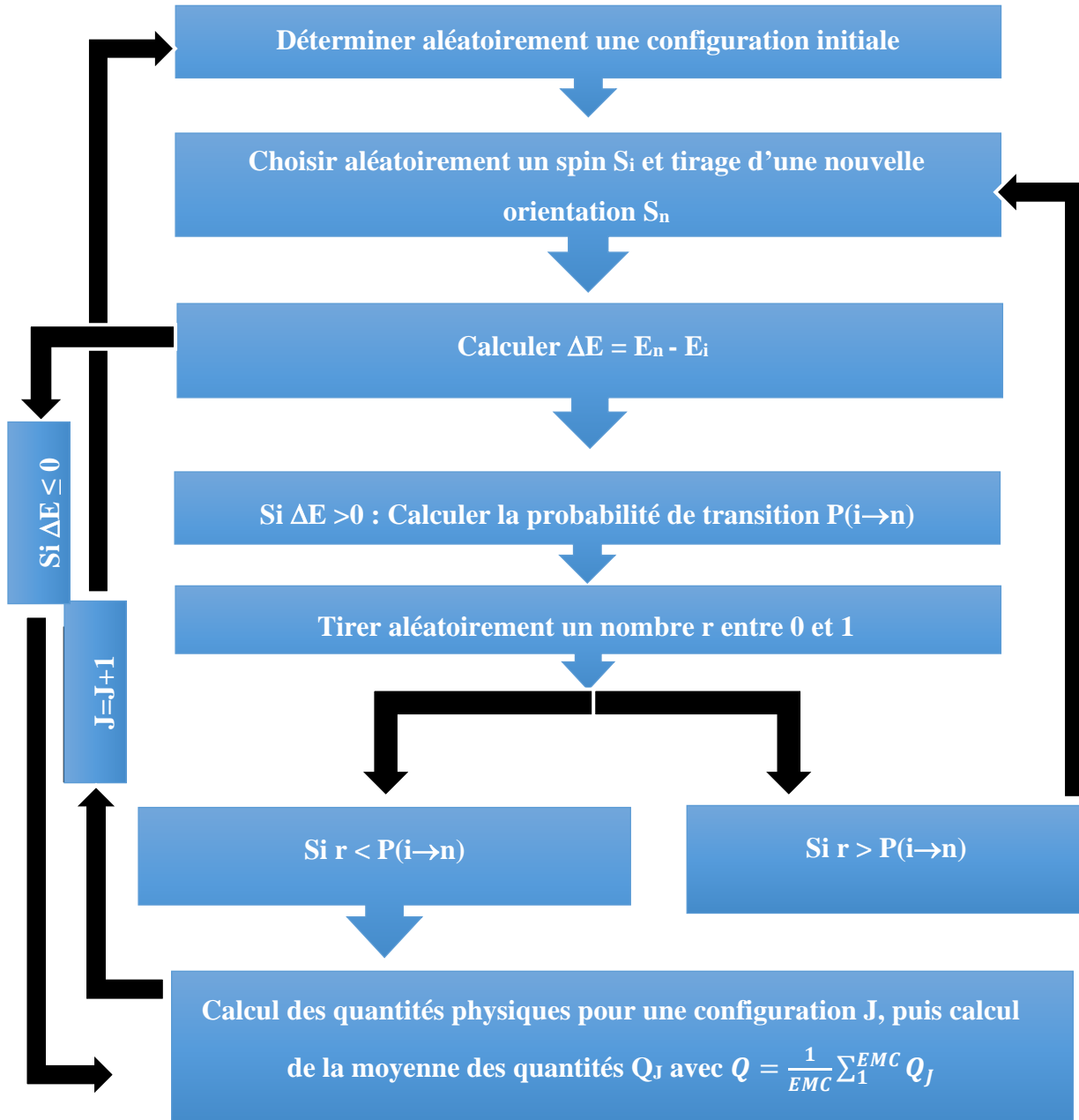
✚ Cas de dilution (présence des impuretés dans le système) :

Dans le cas de la dilution la formule de l'aimantation devient :

$$m_S = \frac{1}{N_S} \sum_i \varepsilon_i S_i \quad (\text{A2.4})$$

La variable d'occupation ε_i est une variable aléatoire non corrélée prenant la valeur $\varepsilon_i=1$, avec une probabilité p (site magnétique occupé) ou $\varepsilon_i=0$, avec une probabilité $1-p$ (site non magnétique)).

ANNEXE 3 : ORGANIGRAMME DE L'ALGORITHME METROPOLIS [27,139,175]



Références

- [1] K.F. Mak, J. Shan, D.C. Ralph, Probing and controlling magnetic states in 2D layered magnetic materials, *Nature Reviews Physics*. 1 (2019) 646–661.
- [2] M. Borsenberger, A. Benabou, C. Baudouin, R. Bigot, P. Faverolle, J.-C. Mipo, Characterization of massive magnetic parts with a dedicated device, *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics*. 57 (2018) 457–472.
- [3] G. Nabi, S. Rehman, M.B. Tahir, N. Malik, R. Yousaf, M. Maraj, M. Rizwan, M. Tanveer, Structural, Optical, and Magnetic Properties of Pure and Vanadium-Doped NiO Microstructures for Spintronics Applications, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. (2020) 1–6.
- [4] B. Dieny, I.L. Prejbeanu, K. Garello, P. Gambardella, P. Freitas, R. Lehndorff, W. Raberg, U. Ebels, S.O. Demokritov, J. Akerman, Opportunities and challenges for spintronics in the microelectronics industry, *Nature Electronics*. 3 (2020) 446–459.
- [5] J. Grollier, D. Querlioz, K.Y. Camsari, K. Everschor-Sitte, S. Fukami, M.D. Stiles, Neuromorphic spintronics, *Nature Electronics*. 3 (2020) 360–370.
- [6] Z. Fadil, Etudes des propriétés magnétiques et diélectriques des nanomatériaux en vue de leurs applications en nanotechnologie : Simulation de Monte Carlo, Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat, 2020.
- [7] S. Retailleau, G. Blaize, A. Dazzi, D. Debarre, M. de Frutos, P. Hesto, N. Kébaïli, C. Mory, D. Nutarelli, H. Pascard, Une approche expérimentale des nanotechnologies en second cycle à l'Université Paris XI, *J3eA*. 4 (2005) 033.
- [8] É. Martin, Modulation de l'anisotropie dans le ferrite de cobalt en couches minces pour des applications en électronique de spin, Thèse de Doctorat, Strasbourg, 2018.
- [9] J.P. Suchet, Propriétés et applications des matériaux semi-conducteurs magnétiques, in: *Annales de Physique*, EDP Sciences, 1970: pp. 67–75.
- [10] F. Bailly, P. Manca, Correlation entre largeur de bande interdite et l'énergie libre d'atomisation des matériaux semi-conducteurs, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 27 (1966) 783–793.
- [11] S. Diaham, Etude du comportement sous haute température de matériaux polyimides en vue de la passivation de composants de puissance à semi-conducteurs grand cap, PhD Thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier, 2007.
- [12] M. Qajjour, N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, W.O. Benomar, L. Bahmad, Dilution effect on the compensation temperature in a honeycomb nano-lattice: Monte Carlo study, *Chinese Journal of Physics*. 63 (2020) 36–44. <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2019.09.038>.
- [13] M. Qajjour, N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.O. Benomar, Compensation behaviors in a tri-layers nano-dicoronylene like-structure with ferrimagnetic mixed spins (3/2,1): Monte Carlo study, *Chinese Journal of Physics*. 68 (2020) 930–939. <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2020.08.028>.
- [14] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, Polarization and dielectric susceptibility of a monolayer coronene like nano-structure: Monte Carlo study, *Physics Letters A*. 384 (2020) 126783. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.126783>.

- [15] N. Maaouni, M. Qajjour, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.O. Benomar, Magnetic and thermal properties of a core-shell borophene structure: Monte Carlo study, *Physica B: Condensed Matter*. 566 (2019) 63–70. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.05.002>.
- [16] D.V. Giri, *Discovery and History of the Electron*, ASIEM, 2017.
- [17] T. Sahdane, A. Mhirech, L. Bahmad, B. Kabouchi, Monte Carlo Study of Magnetic and Thermal Phase Transitions of a Diluted Magnetic Nanosystem, *J Supercond Nov Magn*. 31 (2018) 1089–1093. <https://doi.org/10.1007/s10948-017-4292-1>.
- [18] T. Sahdane, M. Qajjour, N. Maaouni, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.O. Benomar, Thermal and magnetic property behaviors of a binary alloy borophene structure: A Monte Carlo study, *Materials Today Communications*. 25 (2020) 101508. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101508>.
- [19] N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.O. Benomar, Compensation behavior of an anti-ferrimagnetic core-shell nanotube like-structure: Monte Carlo Study, *Solid State Communications*. 321 (2020) 114047. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2020.114047>.
- [20] S. Ahmed, L. Bahmad, A. Benyoussef, A. El Kenz, Mixed spin-1 and spin-1/2 Blume-Emery-Griffiths model on the Bethe lattice: Monte Carlo simulation, *Superlattices and Microstructures*. 109 (2017) 841–851.
- [21] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.O. Benomar, Dilution effects on compensation temperature in borophene core-shell structure: Monte Carlo simulations, *Solid State Communications*. 316–317 (2020) 113944. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2020.113944>.
- [22] A. Feraoun, M. Kerouad, The spin 5/2 Blume-Emery-Griffiths model on a nano-graphene layer: Monte Carlo study, *Solid State Communications*. 277 (2018) 25–32.
- [23] N. Maaouni, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.O. Benomar, The compensation temperature behavior in a diluted extended ferrimagnetic material structure, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 468 (2018) 175–180. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.007>.
- [24] J.D. Alzate-Cardona, D. Sabogal-Suárez, E. Restrepo-Parra, Critical and compensation behavior of a mixed spin-3/2 and spin-5/2 Ising ferrimagnetic system in a graphene layer, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 429 (2017) 34–39. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.01.004>.
- [25] R. Gupta, A.K. Pramanik, Site dilution in SrRuO₃: effects on structural and magnetic properties, *Journal of Physics: Condensed Matter*. 29 (2017) 115801.
- [26] R. Khan, S. Fashu, Z.U. Rehman, A. Khan, M.U. Rahman, Structure and magnetic properties of (Co, Mn) co-doped ZnO diluted magnetic semiconductor nanoparticles, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 29 (2018) 32–37.
- [27] Z. Sanae, *Contributions à l'étude Monte Carlo des propriétés magnétiques des nanomatériaux type graphyne et graphone*, Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat, 2016.
- [28] W. Wang, R. Liu, D. Lv, X. Luo, Monte Carlo simulation of magnetic properties of a nano-graphene bilayer in a longitudinal magnetic field, *Superlattices and Microstructures*. 98 (2016) 458–472. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2016.08.045>.

- [29] S. Vizzini, *Elaboration et caractérisation d'oxydes d'aluminium ultra-minces pour une application aux jonctions tunnels magnétiques*, 2008.
- [30] A. Fert, *Les débuts de la spintronique-Travaux précurseurs et magnéto-résistance géante*, *Reflète de La Physique*. (2009) 5–10.
- [31] T. Dietl, D.D. Awschalom, M. Kaminska, H. Ohno, *Spintronics*, Academic Press, 2009.
- [32] D.W. Abraham, P.E. Batson, W.J. Gallagher, S. Parkin, J. Slonczewski, P.L. Trouilloud, *Limiting magnetoresistive electrical interaction to a preferred portion of a magnetic region in magnetic devices*, Google Patents, 2002.
- [33] W.J. Gallagher, J.H. Kaufman, S.S.P. Parkin, R.E. Scheuerlein, *Magnetic memory array using magnetic tunnel junction devices in the memory cells*, Google Patents, 1997.
- [34] D.E. Heim, S.S. Parkin, *Magnetoresistive spin valve sensor with improved pinned ferromagnetic layer and magnetic recording system using the sensor*, Google Patents, 1995.
- [35] M. Getzlaff, *Fundamentals of magnetism*, Springer Science & Business Media, 2007.
- [36] K. Binder, D.M. Ceperley, J.-P. Hansen, M.H. Kalos, D.P. Landau, D. Levesque, H. Mueller-Krumbhaar, D. Stauffer, J.-J. Weis, *Monte Carlo methods in statistical physics*, Springer Science & Business Media, 2012.
- [37] A.H. Morrish, *The physical principles of magnetism*, *The Physical Principles of Magnetism*, by Allan H. Morrish, Pp. 696. ISBN 0-7803-6029-X. Wiley-VCH, January 2001. (2001) 696.
- [38] R. Francisco Alves, M. Assolin Correa, R. Alves Torquato, T. Andrade dos Passos, F. Bohn, R. Bezerra da Silva, R. Medeiros Gomes, D. Ferreira de Oliveira, *Observation of quasi-diamagnetism and a transition from negative to positive in the exchange bias of a NiMnIn Heusler alloy*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 493 (2020) 165691. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165691>.
- [39] U. Topal, *Co-existence of diamagnetism and ferromagnetism and possible superconductivity in Y8Ba5Zn4O21*, *Materials Characterization*. 62 (2011) 218–222. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2010.12.002>.
- [40] Yu.Kh. Vekilov, E.I. Isaev, B. Johansson, *Diamagnetism in quasicrystals*, *Solid State Communications*. 133 (2005) 473–475. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2004.11.040>.
- [41] J.M. Coey, *Magnetism and magnetic materials*, Cambridge university press, 2010.
- [42] A.B. Shevchenko, M.Yu. Barabash, *One through the other tunneling of the “kink” – Type solitons in domain wall of ferromagnetic film*, *Results in Physics*. 13 (2019) 102294. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2019.102294>.
- [43] M. Yarmohammadi, *Electronic heat capacity and magnetic susceptibility of ferromagnetic silicene sheet under strain*, *Solid State Communications*. 250 (2017) 84–91. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2016.11.019>.
- [44] A. López-Ortega, D. Tobia, E. Winkler, I.V. Golosovsky, G. Salazar-Alvarez, S. Estradé, M. Estrader, J. Sort, M.A. González, S. Suriñach, J. Arbiol, F. Peiró, R.D. Zysler, M.D. Baró, J. Nogués, *Size-Dependent Passivation Shell and Magnetic Properties in Antiferromagnetic/Ferrimagnetic Core/Shell MnO Nanoparticles*, *J. Am. Chem. Soc.* 132 (2010) 9398–9407.
- [45] K.E. Geckeler, H. Nishide, *Advanced nanomaterials*, John Wiley & Sons, 2009.

- [46] M.H. Dodson, E. McClelland-Brown, Magnetic blocking temperatures of single-domain grains during slow cooling, *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 85 (1980) 2625–2637.
- [47] S. Dey, R. Mondal, S.K. Dey, S. Majumder, P. Dasgupta, A. Poddar, V.R. Reddy, S. Kumar, Tuning magnetization, blocking temperature, cation distribution of nanosized $\text{Co}_0.2\text{Zn}_0.8\text{Fe}_2\text{O}_4$ by mechanical activation, *Journal of Applied Physics*. 118 (2015) 103905.
- [48] R.K. Zheng, H. Gu, B. Xu, X.X. Zhang, The origin of the non-monotonic field dependence of the blocking temperature in magnetic nanoparticles, *Journal of Physics: Condensed Matter*. 18 (2006) 5905.
- [49] J.-Y. Bigot, W. Hübner, T. Rasing, R. Chantrell, *Ultrafast Magnetism I*, Springer, 2016.
- [50] G.A.N. Connell, R. Allen, M. Mansuripur, Magneto-optical properties of amorphous terbium–iron alloys, *Journal of Applied Physics*. 53 (1982) 7759–7761.
- [51] M.L. Néel, Propriétés magnétiques des ferrites; ferrimagnétisme et antiferromagnétisme, in: *Annales de Physique*, EDP Sciences, 1948: pp. 137–198.
- [52] N. Miura, Generation of Megagauss Magnetic Fields and Their Application to Solid State Physics, in: *Physics and Engineering Applications of Magnetism*, Springer, 1991: pp. 19–47.
- [53] H.-P.D. Shieh, M.H. Kryder, Magneto-optic recording materials with direct overwrite capability, *Applied Physics Letters*. 49 (1986) 473–474.
- [54] S.A. Deviren, Magnetization plateaus and ground-state phase diagrams of the $S=1$ Ising model on the Shastry Sutherland lattice, *Solid State Communications*. 251 (2017) 73–78. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2016.12.017>.
- [55] N. De La Espriella, G.M. Buendía, Ground state phase diagrams for the mixed Ising $3/2$ and $5/2$ spin model, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 389 (2010) 2725–2732. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2010.03.022>.
- [56] G. Wei, Q. Zhang, Y. Gu, Monte Carlo studies of critical phenomena in mixed spin-1 and spin-3/2 Blume–Capel Ising model on simple cubic lattice, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 301 (2006) 245–250. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2005.06.032>.
- [57] A. Mhirech, S. Aouini, A. Alaoui-Ismaili, L. Bahmad, Bi-layer graphene structure with non-equivalent planes: Magnetic properties study, *Superlattices and Microstructures*. 117 (2018) 382–391. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.03.073>.
- [58] R. Lemos, K.S.T. de Souza, F.A.S. da Silva, D. Rodrigues, J.A. de Castro, M.F. de Campos, Magnetic Domains Observation from Bitter Patterns of NdFeB Alloy, *MSF*. 802 (2014) 569–573. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.802.569>.
- [59] C.-G. Stefanita, *Magnetism: basics and applications*, Springer Science & Business Media, 2012.
- [60] J. Crangle, *Solid State Magnetism*, Springer Science & Business Media, 2012.
- [61] I.J.L. Diaz, N.S. Branco, Monte Carlo simulations of an Ising bilayer with non-equivalent planes, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 468 (2017) 158–170. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2016.10.055>.
- [62] N. Metropolis, S. Ulam, The Monte Carlo Method, *Journal of the American Statistical Association*. 44 (1949) 335–341. <https://doi.org/10.1080/01621459.1949.10483310>.

- [63] M. Newman, G. Barkema, Monte carlo methods in statistical physics chapter 1-4, Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [64] D.P. Landau, K. Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Third Edition, (n.d.) 489.
- [65] M. Blume, V.J. Emery, R.B. Griffiths, Ising model for the λ transition and phase separation in He 3-He 4 mixtures, *Physical Review A*. 4 (1971) 1071.
- [66] S. Krinsky, D. Furman, Exact renormalization group exhibiting tricritical fixed point for a spin-one Ising model in one dimension, *Physical Review B*. 11 (1975) 2602.
- [67] M. Blume, Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in U O 2, *Physical Review*. 141 (1966) 517.
- [68] J.A. Plascak, J.G. Moreira, Mean field solution of the general spin Blume-Capel model, *Physics Letters A*. 173 (1993) 360–364.
- [69] C. Gaetan, X. Guyon, Modélisation et statistique spatiales, Springer, 2008.
- [70] B.A. Berg, Introduction to Markov chain Monte Carlo simulations and their statistical analysis, *Markov Chain Monte Carlo Lect Notes Ser Inst Math Sci Natl Univ Singap*. 7 (2005) 1–52.
- [71] L. Onsager, Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, *Physical Review*. 65 (1944) 117.
- [72] K. Binder, Introduction: Theory and “technical” aspects of Monte Carlo simulations, in: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Springer, 1986: pp. 1–45.
- [73] K. Hukushima, K. Nemoto, Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations, *Journal of the Physical Society of Japan*. 65 (1996) 1604–1608.
- [74] L. Faming, W. Jian-sheng, *Markov chain Monte Carlo: innovations and applications*, World Scientific, 2005.
- [75] I.T. Dimov, *Monte Carlo methods for applied scientists*, World Scientific, 2008.
- [76] G. Fishman, *Monte Carlo: concepts, algorithms, and applications*, Springer Science & Business Media, 2013.
- [77] R.J. Glauber, Time-dependent statistics of the Ising model, *Journal of Mathematical Physics*. 4 (1963) 294–307.
- [78] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines, *The Journal of Chemical Physics*. 21 (1953) 1087–1092.
- [79] W. Selke, L.N. Shchur, Critical Binder cumulant in two-dimensional anisotropic Ising models, *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 38 (2005) L739.
- [80] W. Selke, Critical Binder cumulant of two-dimensional Ising models, *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*. 51 (2006) 223–228.
- [81] W. Selke, L.N. Shchur, Critical Binder cumulant in a two-dimensional anisotropic Ising model with competing interactions, *Physical Review E*. 80 (2009) 042104.
- [82] M. Hasenbusch, The Binder cumulant at the Kosterlitz–Thouless transition, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2008 (2008) P08003.

- [83] A. Feraoun, M. Kerouad, Nano-graphene monolayer with higher-order exchange couplings: Monte Carlo study, *Physics Letters A*. 382 (2018) 116–120.
- [84] E. Konstantinova, Theoretical simulations of magnetic nanotubes using Monte Carlo method, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 320 (2008) 2721–2729.
- [85] S. Chen, D. Haziza, Jackknife empirical likelihood method for multiply robust estimation with missing data, *Computational Statistics & Data Analysis*. 127 (2018) 258–268.
- [86] P. Young, Jackknife and bootstrap resampling methods in statistical analysis to correct for bias, *Statistical Science*. 11 (1996) 189–228.
- [87] H. Rezania, N. Tawoose, Magnetic field effects on charge structure factors of gapped graphene structure, *Superlattices and Microstructures*. 114 (2018) 361–369. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.12.059>.
- [88] D.G. Papageorgiou, I.A. Kinloch, R.J. Young, Mechanical properties of graphene and graphene-based nanocomposites, *Progress in Materials Science*. 90 (2017) 75–127. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.07.004>.
- [89] K. Chu, X. Wang, Y. Li, D. Huang, Z. Geng, X. Zhao, H. Liu, H. Zhang, Thermal properties of graphene/metal composites with aligned graphene, *Materials & Design*. 140 (2018) 85–94. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.11.048>.
- [90] J.D. Gouveia, R.G. Dias, Spin and charge density waves in the Lieb lattice, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 405 (2016) 292–303.
- [91] V. Yelpo, V. Cornette, J.P. Toso, R.H. López, Characterization of nanostructured carbon CMK-3 by means of Monte Carlo simulations, *Carbon*. 121 (2017) 106–113.
- [92] Y.-C. Hua, B.-Y. Cao, An efficient two-step Monte Carlo method for heat conduction in nanostructures, *Journal of Computational Physics*. 342 (2017) 253–266.
- [93] H.N. Motlagh, G. Rezaei, Monte Carlo simulation of magnetic properties of mixed spin (3/2, 1) ferromagnetic and ferrimagnetic disordered binary alloys with amorphous structure, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 445 (2018) 26–36.
- [94] M. Qajjour, N. Maaouni, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, Dilution effect on the magnetic properties of the spin Lieb nanolattice: Monte Carlo simulations, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 482 (2019) 312–316. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.03.073>.
- [95] K. Chu, F. Wang, X. Wang, D. Huang, Anisotropic mechanical properties of graphene/copper composites with aligned graphene, *Materials Science and Engineering: A*. 713 (2018) 269–277. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.12.080>.
- [96] T. Guerra, L. Leite, S. Azevedo, B. de Lima Bernardo, Magnetic, electronic and optical properties of different graphene, BN and BC 2 N nanoribbons, *Superlattices and Microstructures*. 104 (2017) 532–539. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.03.009>.
- [97] A.-B. Guo, W. Jiang, N. Zhang, Magnetic properties of a doped graphene-like bilayer, *Physica B: Condensed Matter*. 513 (2017) 21–28. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.02.002>.
- [98] L. Parisi, R. Di Giugno, I. Deretzis, G.G.N. Angilella, A. La Magna, Kinetic Monte Carlo simulations of vacancy evolution in graphene, *Materials Science in Semiconductor Processing*. 42 (2016) 179–182. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2015.07.033>.

- [99] A.K. Salimath, B. Ghosh, Monte Carlo simulation studies of spin transport in graphene armchair nanoribbons, *Physica B: Condensed Matter*. 450 (2014) 116–120. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2014.05.044>.
- [100] M. Bresciani, P. Palestri, D. Esseni, L. Selmi, B. Szafranek, D. Neumaier, Interpretation of graphene mobility data by means of a semiclassical Monte Carlo transport model, *Solid-State Electronics*. 89 (2013) 161–166. <https://doi.org/10.1016/j.sse.2013.08.004>.
- [101] T. Kaneyoshi, Compensation temperature in a cylindrical Ising nanowire (or nanotube), *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 390 (2011) 3697–3703. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2011.06.003>.
- [102] H.K. Mohamad, E.P. Domashevskaya, A.F. Klinskikh, Compensation temperatures induced by longitudinal fields in a mixed spin Ising ferrimagnet, *Solid State Communications*. 150 (2010) 1253–1257. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2010.03.033>.
- [103] G. Mert, The multi-compensation temperatures for the four-sublattice Heisenberg ferrimagnetic system, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 404 (2014) 217–223.
- [104] R.G.B. Mendes, F.S. Barreto, J.P. Santos, Magnetic properties of the mixed spin 1/2 and spin 1 hexagonal nanotube system: Monte Carlo simulation study, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 471 (2019) 365–369.
- [105] E. Albayrak, The random distribution of the coordination numbers in the mixed spin-1/2 and spin-2 Blume-Capel model, *Chinese Journal of Physics*. 56 (2018) 2291–2296.
- [106] A. Oubelkacem, Y. Benhouria, I. Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja, The magnetic properties and hysteresis behaviors of the mixed spin-(1/2, 1) Ferrimagnetic nanowire, *Physica B: Condensed Matter*. 549 (2018) 82–86.
- [107] M. Mouhib, N. Benayad, M. Azhari, Mixed spin (1/2, 1) transverse Ising nanoparticles, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 419 (2016) 325–337.
- [108] S.S. Ahmed, L. Bahmad, A. El Yousfi, A. Benyoussef, A. El Kenz, A.G. El Hachimi, Mixed spin-1 and spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths model with external field on a honeycomb lattice, *Superlattices and Microstructures*. 123 (2018) 1–11.
- [109] W. Wang, D. Lv, Y. Liu, Y. Yang, Z. Gao, X. Zhao, Surface effect on compensation and critical behaviors of a ferrimagnetic mixed-spin (1, 3/2) Ising system with two alternating layers, *Superlattices and Microstructures*. 112 (2017) 688–696.
- [110] J.R.V. Pereira, T.M. Tunes, A.S. de Arruda, M. Godoy, Thermal properties of the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising ferrimagnetic system with two different random single-ion anisotropies, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 500 (2018) 265–272.
- [111] B. Deviren, Y. Şener, Magnetic properties of mixed spin (1, 3/2) Ising nanoparticles with core-shell structure, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 386 (2015) 12–19.
- [112] C.-L. Zou, D.-Q. Guo, F. Zhang, J. Meng, H.-L. Miao, W. Jiang, Magnetization, the susceptibilities and the hysteresis loops of a borophene structure, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 104 (2018) 138–145.
- [113] Z. Zhang, Y. Yang, E.S. Penev, B.I. Yakobson, Elasticity, flexibility, and ideal strength of borophenes, *Advanced Functional Materials*. 27 (2017) 1605059.
- [114] H.R. Jiang, Z. Lu, M.C. Wu, F. Ciucci, T.S. Zhao, Borophene: a promising anode material offering high specific capacity and high rate capability for lithium-ion batteries, *Nano Energy*. 23 (2016) 97–104.

- [115] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen, K. Wu, Experimental realization of two-dimensional boron sheets, *Nature Chemistry*. 8 (2016) 563–568.
- [116] A.J. Mannix, X.-F. Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers, X. Liu, B.L. Fisher, U. Santiago, J.R. Guest, Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs, *Science*. 350 (2015) 1513–1516.
- [117] W. Li, L. Kong, C. Chen, J. Gou, S. Sheng, W. Zhang, H. Li, L. Chen, P. Cheng, K. Wu, Experimental realization of honeycomb borophene, *Science Bulletin*. 63 (2018) 282–286.
- [118] R. Bhuvanewari, R. Chandiramouli, DFT investigation on the adsorption behavior of dimethyl and trimethyl amine molecules on borophene nanotube, *Chemical Physics Letters*. 701 (2018) 34–42.
- [119] Y. Yang, W. Wang, H. Ma, Q. Li, Z. Gao, T. Huang, Magnetic and thermodynamic properties of a ferrimagnetic mixed-spin (1/2, 1, 3/2) Ising nanoisland: Monte Carlo study, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 108 (2019) 358–371.
- [120] K. Shi, W. Jiang, A. Guo, K. Wang, C. Wu, Magnetic and thermodynamic properties of Ising model with borophene structure in a longitudinal magnetic field, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 500 (2018) 11–22.
- [121] Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, Dilution effects on compensation temperature in nano-trilayer graphene structure: Monte Carlo study, *Physica B: Condensed Matter*. 564 (2019) 104–113. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.03.006>.
- [122] X. Li, X. Shang, X.-Y. Zhang, B. Dong, K.-L. Yan, Y.-R. Liu, G.-Q. Han, J.-Q. Chi, Y.-M. Chai, C.-G. Liu, Ni-Se nanostructures dependent on different solvent as efficient electrocatalysts for hydrogen evolution reaction in alkaline media, *Materials Chemistry and Physics*. 207 (2018) 389–395.
- [123] S.F. Moya, R.L. Martins, M. Schmal, Monodispersed and nanostructured Ni/SiO₂ catalyst and its activity for non oxidative methane activation, *Applied Catalysis A: General*. 396 (2011) 159–169.
- [124] S. Kazan, A.C. Başaran, B. Aktaş, M. Özdemir, Y. Öner, Magnetic properties of nanostructured (Co/Cu/Co)/Fe/Si multi-layer, *Physica B: Condensed Matter*. 403 (2008) 1117–1118.
- [125] Y.G. Yıldız, Origin of the hardness in the monolayer nanographene, *Physics Letters A*. 383 (2019) 2333–2338.
- [126] Q. Wu, D. Xie, Z. Jia, H. Zhang, Mechanical properties and simulation of nanographene/polyvinylidene fluoride composite films, *Composites Part B: Engineering*. 156 (2019) 148–155.
- [127] J. Leitner, V. Bartůuněk, D. Sedmidubský, O. Jankovský, Thermodynamic properties of nanostructured ZnO, *Applied Materials Today*. 10 (2018) 1–11.
- [128] U. Lucia, Thermodynamic approach to nano-properties of cell membrane, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 407 (2014) 185–191.
- [129] D.M. Hoat, Theoretical study of electronic structure, thermoelectric and thermodynamic properties of 2H-AgAlO₂, *Physica B: Condensed Matter*. 558 (2019) 109–115.

- [130] M. Yarmohammadi, Optical conductivity of the spin Lieb nanolattice, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 419 (2016) 240–244. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.06.032>.
- [131] Y. Wang, J. Yan, H. Cheng, N. Chen, P. Yan, F. Yang, J. Ouyang, Lead zirconate titanate and barium titanate bi-layer ferroelectric films on Si, *Ceramics International*. 45 (2019) 9032–9037.
- [132] D. Lv, Y. Ma, W. Jiang, X. Si, W. Gao, Magnetic and thermodynamic properties of a ferromagnetic mixed-spin (1/2, 1, 3/2) three-layer film superlattice, *Superlattices and Microstructures*. 119 (2018) 46–58.
- [133] G.D. Ngantso, M. Karimou, F. Hontinfinde, L. Bahmad, A. Benyoussef, Magnetic properties of a tri-layer superlattice: Mean field study and Monte Carlo simulation, *Physica B: Condensed Matter*. 563 (2019) 85–92.
- [134] B. Scheibe, K. Tadyszak, M. Jarek, N. Michalak, M. Kempniński, M. Lewandowski, B. Peplińska, K. Chybczyńska, Study on the magnetic properties of differently functionalized multilayered Ti₃C₂T_x MXenes and Ti-Al-C carbides, *Applied Surface Science*. 479 (2019) 216–224.
- [135] H. Moon, S. Kim, H. Jung, H.-S. Lee, W. Lee, Layer-number dependence of the magnetic properties of MnBi films, *Applied Surface Science*. 420 (2017) 618–624.
- [136] Y. Benhouria, N. Khossossi, M. Houmad, I. Essaoudi, A. Ainane, R. Ahuja, Dynamic magneto-caloric effect of a multilayer nanographene: Dynamic quantum Monte Carlo, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 105 (2019) 139–145.
- [137] I.J.L. Diaz, N. da S. Branco, Monte Carlo study of an anisotropic Ising multilayer with antiferromagnetic interlayer couplings, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 490 (2018) 904–917.
- [138] A. Feraoun, S. Amraoui, M. Kerouad, Magnetic properties of a mixed spin-(5/2, 2) Ising core/shell nanoparticle: Monte Carlo study, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 526 (2019) 120924.
- [139] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.O. Benomar, Dielectric properties of a monolayer nano-graphyne structure: Monte Carlo simulations, *Superlattices and Microstructures*. 135 (2019) 106285.
- [140] X.-S. Wang, F. Zhang, N. Si, J. Meng, Y.-L. Zhang, W. Jiang, Unique magnetic and thermodynamic properties of a zigzag graphene nanoribbon, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 527 (2019) 121356.
- [141] K.-L. Shi, W. Jiang, Monte Carlo study of magnetic and thermodynamic properties of a 2D boron clusters in a magnetic field, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*. 101 (2018) 94–102.
- [142] J. Strečka, Exact results of a mixed spin-1/2 and spin-S Ising model on a bathroom tile (4–8) lattice: Effect of uniaxial single-ion anisotropy, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 360 (2006) 379–390.
- [143] A.-F. Ngomsik, A. Bee, M. Draye, G. Cote, V. Cabuil, Magnetic nano- and microparticles for metal removal and environmental applications: a review, *Comptes Rendus Chimie*. 8 (2005) 963–970.

- [144] K. Yamaguchi, K. Suzuki, O. Nittono, K. Yamada, M. Enokizono, T. Takagi, Monte Carlo simulation for magnetic domain wall displacements in magnetic nano-wires with local disorders, *IEEE Transactions on Magnetics*. 45 (2009) 1622–1625.
- [145] A. Kusior, J. Banas, A. Tenczek-Zajac, P. Zubrzycka, A. Micek-Ilnicka, M. Radecka, Structural properties of TiO₂ nanomaterials, *Journal of Molecular Structure*. 1157 (2018) 327–336.
- [146] N.B. Singh, S.K. Saxena, M. Kumar, Effect of nanomaterials on the properties of geopolymer mortars and concrete, *Materials Today: Proceedings*. 5 (2018) 9035–9040.
- [147] S. Riahi, A. Nazari, The effects of nanoparticles on early age compressive strength of ash-based geopolymers, *Ceramics International*. 38 (2012) 4467–4476.
- [148] P. Mathé, E. Novak, Simple Monte Carlo and the metropolis algorithm, *Journal of Complexity*. 23 (2007) 673–696.
- [149] Z. Fadil, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar, Blume-Capel model of a bi-layer graphyne structure with RKKY Interactions: Monte Carlo simulations, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 491 (2019) 165559. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165559>.
- [150] P.V. Santos, F.A. da Costa, J.M. de Araújo, The random field Blume-Capel model revisited, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 451 (2018) 737–740.
- [151] I.J.L. Diaz, N.S. Branco, Ferrimagnetism and compensation temperature in spin-1/2 Ising trilayers, *Physica B: Condensed Matter*. 529 (2018) 73–79.
- [152] S. Aouini, S. Ziti, H. Labrim, L. Bahmad, Compensation temperature in a nano-square with a core-shell structure: Monte Carlo study, *Superlattices and Microstructures*. 100 (2016) 246–251.
- [153] W. Wang, C. Chang, Q. Li, F. Xue, L. Sun, T. Huang, Magnetic and thermodynamic properties of a triple-layer film superlattice: A Monte Carlo study, *Superlattices and Microstructures*. 136 (2019) 106325.
- [154] M. Yarmohammadi, Magnon heat capacity and magnetic susceptibility of the spin Lieb lattice, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 417 (2016) 208–213. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.05.091>.
- [155] R. Chen, B. Zhou, Spin Chern number and topological phase transition on the Lieb lattice with spin-orbit coupling, *Physics Letters A*. 381 (2017) 944–948. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.01.021>.
- [156] W. Wang, Z. Peng, S. Lin, Q. Li, D. Lv, S. Yang, Monte Carlo simulation of magnetic properties of a ferrimagnetic nanoisland with hexagonal prismatic core-shell structure, *Superlattices and Microstructures*. 113 (2018) 178–193. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.10.041>.
- [157] J.D. Gouveia, R.G. Dias, Magnetic phase diagram of the Hubbard model in the Lieb lattice, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 382 (2015) 312–317. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.02.005>.
- [158] Y. Yang, W. Wang, D. Lv, J. Liu, Z. Gao, Z. Wang, Monte Carlo study of magnetic behaviors in a quadrangle ferrimagnetic Ising nanoisland, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 120 (2018) 109–122.
- [159] Y. Zhong, X. Liang, W. Tan, Y. Zhong, H. He, J. Zhu, P. Yuan, Z. Jiang, A comparative study about the effects of isomorphous substitution of transition metals (Ti, Cr, Mn, Co

- and Ni) on the UV/Fenton catalytic activity of magnetite, *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*. 372 (2013) 29–34. <https://doi.org/10.1016/j.molcata.2013.01.038>.
- [160] Z.L. Cui, L.F. Dong, C.C. Hao, Microstructure and magnetic property of nano-Fe particles prepared by hydrogen arc plasma, *Materials Science and Engineering: A*. 286 (2000) 205–207. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(00\)00715-2](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(00)00715-2).
- [161] K. Majdzadeh-Ardakani, M.M. Banaszak Holl, Nanostructured materials for microwave receptors, *Progress in Materials Science*. 87 (2017) 221–245. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.02.005>.
- [162] M. Yarmohammadi, Dynamical thermal conductivity of the spin Lieb lattice, *Solid State Communications*. 234 (2016) 14–20.
- [163] D. Guzmán-Silva, C. Mejía-Cortés, M.A. Bandres, M.C. Rechtsman, S. Weimann, S. Nolte, M. Segev, A. Szameit, R.A. Vicencio, Experimental observation of bulk and edge transport in photonic Lieb lattices, *New Journal of Physics*. 16 (2014) 063061.
- [164] F. Diebel, D. Leykam, S. Kroesen, C. Denz, A.S. Desyatnikov, Conical diffraction and composite Lieb bosons in photonic lattices, *Physical Review Letters*. 116 (2016) 183902.
- [165] R. Masrour, A. Jabar, Ground state and magnetic phase transitions of the spin Lieb nanolattice: Monte Carlo simulations, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*. 491 (2018) 843–851.
- [166] M. Moisan, D. Kéroack, L. Stafford, *Physique atomique et spectroscopie optique*, EDP sciences, 2017.
- [167] M.A. Ruderman, C. Kittel, Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons, *Physical Review*. 96 (1954) 99.
- [168] Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W.O. Benomar, Magnetic properties of naphthalene-like nano-structure with RKKY interactions: Monte Carlo simulations, *Chinese Journal of Physics*. 64 (2020) 295–304.
- [169] P.W. Anderson, Antiferromagnetism. Theory of Superexchange Interaction, *Phys. Rev.* 79 (1950) 350–356. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.79.350>.
- [170] A. Crépieux, C. Lacroix, Dzyaloshinsky–Moriya interactions induced by symmetry breaking at a surface, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 182 (1998) 341–349. [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(97\)01044-5](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(97)01044-5).
- [171] kramers, L'interaction Entre les Atomes Magnétogènes dans un Cristal Paramagnétique, *Physica*. 1 (1934) 182–192. [https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(34\)90023-9](https://doi.org/10.1016/S0031-8914(34)90023-9).
- [172] P.W. Anderson, New Approach to the Theory of Superexchange Interactions, *Phys. Rev.* 115 (1959) 2–13. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.115.2>.
- [173] A. Kumar, S. Fähler, H. Schloerb, K. Leistner, L. Schultz, Competition between shape anisotropy and magnetoelastic anisotropy in Ni nanowires electrodeposited within alumina templates, *Physical Review B*. 73 (2006) 064421.
- [174] G.H.O. Daalderop, Magnetocrystalline anisotropy and orbital moments in transition-metal compounds, *Phys. Rev. B*. 44 (1991) 12054–12057. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.44.12054>.
- [175] T. Sahdane, Propriétés magnétiques de nanomatériaux : étude par la méthode Monte Carlo, Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Mohammed V, Rabat, 2017.



Liste des publications

- 1) **M. Qajjour**, N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, W. Ousi Benomar, L. Bahmad. Compensation Behaviors in a Tri-layers Nano-Dicoronylene Like-Structure with Ferrimagnetic Mixed Spins (3/2,1): Monte Carlo Study. **Chinese Journal of Physics**. 68 (2020) 930-939. <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2020.08.028>
- 2) **M. Qajjour**, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, W. Ousi Benomar, L. Bahmad. Magnetic Properties of a Diluted Bi-layer Borophene Structure: Monte Carlo Study. **Integrated Ferroelectrics**. 212 (2020) 120-134. <https://doi.org/10.1080/10584587.2020.1819041>
- 3) **M. Qajjour**, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, W. Ousi Benomar, L. Bahmad. Magnetic Properties of a Bi-Layer Borophene Structure with Mixed Spins: Monte Carlo Study. **Journal of Low Temperature Physics** 202 (2020) 231-246. <https://doi.org/10.1007/s10909-020-02543-x>
- 4) **M. Qajjour**, N. Maaouni, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, W. Ousi Benomar, L. Bahmad. Dilution effect on the compensation temperature in a honeycomb nano-lattice: Monte Carlo study. **Chinese Journal of Physics**. 63 (2020) 36-44. <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2019.09.038>.
- 5) **M. Qajjour**, N. Maaouni, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar. Dilution effect on the magnetic properties of the spin Lieb nanolattice: Monte Carlo simulations. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**. 482 (2019) 312-316. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.03.073>.
- 6) Z. Fadil, N. Maaouni, **M. Qajjour**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar. Magnetization and susceptibility behaviors in a bi-layer graphyne structure: A Monte Carlo study. **Physica B: Condensed Matter**. 578 (2020) 411852. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.411852>.
- 7) T. Sahdane, **M. Qajjour**, N. Maaouni, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar. Thermal and magnetic property behaviors of a binary alloy borophene structure: A Monte Carlo study. **Materials Today Communications**. 25 (2020) 101508. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101508>.
- 8) Z. Fadil, N. Maaouni, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad and W. Ousi Benomar, Blume-Capel model of a nano-Stanene like structure with RKKY interactions: Monte Carlo simulations. **Phase Transitions**, 93 (2020) 1.

<https://doi.org/10.1080/01411594.2020.1758320>

- 9) N. Maaouni, **M. Qajjour**, Z. Fadil, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar. Magnetic and thermal properties of a core-shell borophene structure: Monte Carlo study. **Physica B: Condensed Matter**. 566 (2019) 63-70.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.05.002>.
- 10) Z. Fadil, **M. Qajjour**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar. Dilution effects on compensation temperature in nano-trilayer graphene structure: Monte Carlo study. **Physica B: Condensed Matter**. 564 (2019) 104-113.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.03.006>.
- 11) Z. Fadil, **M. Qajjour**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar. Blume-Capel model of a bi-layer graphyne structure with RKKY Interactions: Monte Carlo simulations. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**. 491 (2019) 165559. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165559>.
- 12) N. Maaouni, **M. Qajjour**, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad, W. Ousi Benomar. The compensation temperature behavior in a diluted extended ferrimagnetic material structure, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**. 468 (2018) 175-180.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.007>.



Contents lists available at ScienceDirect

Chinese Journal of Physics

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

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

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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

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

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

* Corresponding author.

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

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

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

Available online 14 November 2020

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



Magnetic Properties of a Diluted Bi-Layer Borophene Structure: Monte Carlo Study

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

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

ABSTRACT

Using Monte Carlo simulations under the Metropolis algorithm, we study the dilution effect on the magnetic properties in a bi-layer borophene structure. The system is formed by two layers, where each layer contains two sub-lattices of 210 atoms (with mixed spins $\sigma = 3/2$ and $S = 5/2$). The ground-state phase diagrams are presented in different physical parameter planes. Besides, the thermal variation of the total and partial magnetizations and susceptibilities are reported by applying Monte Carlo method. Furthermore, the dilution effect of the S spins and/or σ spins is investigated. It is found that the dilution affects the magnetizations and the hysteresis loops of the studied system strongly.

ARTICLE HISTORY

Received 3 May 2020
Accepted 21 August 2020

KEYWORDS

Bi-layer borophene structure; Monte Carlo simulations; dilution probability; hysteresis loops; magnetization; transitional temperature

1. Introduction

Recently, many researchers in the physics of condensed matter have given enough interest to study several properties of nanostructures experimentally [1–4] and theoretically [5–9]. On the other hand, the investigation of the magnetic and thermodynamic properties of nanostructures has been the object of several kinds of research such as the study of structures with one layer [10,11], bi-layers [12,13], three-layers [14–16] and multi-layers [17–20]. In addition, to investigate several properties of nanostructures, the geometry can take a simple form or core-shell form [21–23].

We study the magnetic properties of a bi-layer borophene structure due to the fact that in the last years, the scientific community gave a lot of importance to this material forasmuch the properties which possessed. The borophene is a two-dimensional structure of boron-containing seven units, and each unit is formed by 36 atoms with a hexagonal hole in the middle of the unit. The borophene has many applications such as spintronics [24], the researchers predict that the borophene may be entirely metallic [25].

Many other research works have been developed to reveal all the characteristics of the borophene experimentally and theoretically. In chemistry, Jiang et al. [26] have investigated a new application of borophene as an anode material for lithium-ion batteries. The authors concluded that the borophene, as a promising anode material for lithium-ion batteries, has good potential in terms of energy density and power density.

CONTACT M. Qajjour  qajjour@gmail.com

© 2020 Taylor & Francis Group, LLC



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

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

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

Abstract

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

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

1 Introduction

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

✉ M. Qajjour
qajjour@gmail.com

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



Contents lists available at ScienceDirect

Chinese Journal of Physics

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

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



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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

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

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

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

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

* Corresponding author.

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

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

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

Available online 24 October 2019

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



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

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

Research articles

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

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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

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

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

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

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

^{*} Corresponding author.E-mail address: bahmad@fsc.ac.ma (L. Bahmad).<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.03.073>

Received 14 December 2018; Received in revised form 14 March 2019; Accepted 17 March 2019

Available online 18 March 2019

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



Contents lists available at ScienceDirect

Physica B: Physics of Condensed Matter

journal homepage: <http://www.elsevier.com/locate/physb>

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

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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

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

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

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

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

2. Model and method

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

^{*} Corresponding author.

E-mail address: fadilzakaria04@gmail.com (Z. Fadil).

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

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

Available online 8 November 2019

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



Contents lists available at ScienceDirect

Materials Today Communications

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

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

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

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

ARTICLE INFO

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

ABSTRACT

In this work, we investigate the magnetic properties of a binary alloy borophene structure of the form A_pB_{1-p} . The calculations were performed using the Monte Carlo method under the Metropolis algorithm. The studied borophene structure consists of atoms A of spin $S = 3/2$ with a concentration p and atoms B of spin $\sigma = 2$ with a concentration $1-p$. The Hamiltonian of the system includes the ferromagnetic coupling between A and B atoms. The behavior of the total and partial magnetizations are explored for different values of the concentration p . In addition, under specific values of the physical parameters and the concentration p , we study the possibility of the appearance of the compensation point. Besides, The hysteresis cycles have been established and discussed.

1. Introduction

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

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

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

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

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

There are many studies focus on borophene structure [43,46], but

^{*} Corresponding author.

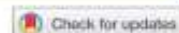
E-mail address: maoouni.n@gmail.com (N. Maaoui).

<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101508>

Received 12 July 2020; Received in revised form 28 July 2020; Accepted 28 July 2020

Available online 09 August 2020

2352-4928/ © 2020 Elsevier Ltd. All rights reserved.



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

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

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

ABSTRACT

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

ARTICLE HISTORY

Received 21 December 2019
Accepted 16 April 2020

KEYWORDS

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

Highlights

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

1. Introduction

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



Contents lists available at ScienceDirect

Physica B: Condensed Matter

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

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



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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

Borophene structure
Magnetic properties
Monte Carlo simulations
Exchange coupling interactions
Compensation temperature
Ferromagnetic materials

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

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

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

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

metallic with relatively high electron mobility ($6.6 \cdot 10^5 \text{ m.s}^{-1}$) [13–15], in addition, it would have optical transmittance values of up to 100% in the visible, which make it more transparent than Graphene [16–19]. The Boron is also close to the carbon and it has been predicted to form 2D allotropes as their neighbor on the periodic table. The boron-boron bond is almost as strong as the carbon-carbon bond which allow to its mechanical properties close to those of Graphene [20–22]. The first attempts to synthesize boron-based flat structures focused on small clusters, such as B_{30} , B_{25} and B_{26} [23–28], as the basis for an extended borophene structure in 2015 [29] then in 2016 [30]. The first sheets of borophene were synthesized on silver surfaces Ag (111) under ultra-high vacuum conditions by epitaxial [31]. Moreover, it would be super-stretchy and flexible, and should undergo stress-induced allotropic transitions [32–36]; it would have excellent conductivity electronics [37] which makes it a good candidate to be used as anode [37,38] or electrical contact [39], it would also have better optical conductivity than Graphene [40–42], and would even be super-conducting [43,44]. These results, together with the potential intrinsic properties of borophene, have generated considerable interest, especially for applications in the field of energy storage [45,46].

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

^{*} Corresponding author.

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

<https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.03.002>

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

Available online 07 May 2019

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



Contents lists available at ScienceDirect

Physica B: Condensed Matter

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

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

Z. Fadil^a, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad^{a*}, W. Ousi Benomar^a Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCSI), Faculty of Sciences, Mohammed V University, P. O. Box 1014, Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

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

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

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

studies have been made on the ferromagnetic properties of nano-systems, by using different methods such as the mean-field approximation (MFA) [15] and the effective field theory (EFT) [16,17]. The Monte Carlo simulations have been also used to calculate the magnetic properties of nano-graphene lattice [18–25] and nano-graphene bi-layer structure with non-equivalent planes [26,27]. On the other hand, the presence of a compensation temperature is possible in these magnetic systems when the total magnetization is zero [28–30]. In addition, to study the effect of dilution on magnetic properties is very important, because pure systems are rare in nature [37,38].

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

2. Model and method

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

* Corresponding author.

** Corresponding author.

E-mail addresses: fadilzakaria04@gmail.com (Z. Fadil), bahmad@fsc.ma (L. Bahmad).<https://doi.org/10.1016/j.physb.2019.03.009>

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

Available online 09 March 2019

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



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

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

Invited Review

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

Z. Fadil^a, M. Qajjour, A. Mhirech, B. Kabouchi, L. Bahmad^a, W. Ousi Benomar^a Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCS2), Faculty of Sciences, P. O. Box 1014, Mohamed V University in Rabat, Morocco

ARTICLE INFO

Keywords:

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

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

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

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

2. Model and method

The bi-layer mixed graphyne structure is studied with free boundaries conditions. The system is composed by two planes A and B with mixed spins $\sigma = 3/2$ and $S = 1$, separated by a number (L) of non-magnetic layers. Such a compound contains $N_A = N_B = 108$ atoms, (see Fig. 1). Several algorithms have been developed to generate random sequence statistics, but none of them has reached the popularity of the algorithm of Metropolis et al. [36]. We have generated a Monte Carlo calculation of 10^7 steps per spin. To reach equilibrium, we eliminate the first 10^4 steps of the simulations. We have averaged over each parameter taking account the Jackknife method [37,38].

The Hamiltonian of the studied system is given by:

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

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

^a Corresponding authors.

E-mail addresses: fadilzakaria04@gmail.com (Z. Fadil), labou2020@gmail.com (L. Bahmad).

<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.165559>

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

Available online 10 July 2019

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



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Magnetism and Magnetic Materials

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

Research articles

The compensation temperature behavior in a diluted extended ferrimagnetic material structure

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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

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

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

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

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

2. Theory and model

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

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

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

^{*} Corresponding author.

E-mail address: bahmad@ur.ac.ma (L. Bahmad).

<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.08.007>

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

Available online 06 August 2018

0304-8853/© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.