



Systèmes modèles et systèmes magnétiques : étude par simulations Monte Carlo

Pierre-Emmanuel Berche

► To cite this version:

Pierre-Emmanuel Berche. Systèmes modèles et systèmes magnétiques : étude par simulations Monte Carlo. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université de Rouen, 2009. tel-00437483

HAL Id: tel-00437483

<https://theses.hal.science/tel-00437483>

Submitted on 30 Nov 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université de Rouen
UFR des Sciences et Techniques

Habilitation à diriger des recherches

Discipline : Physique

Spécialité : Sciences des Matériaux

Systèmes modèles et systèmes magnétiques : étude par simulations Monte Carlo

Pierre-Emmanuel Berche

Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634

Soutenance publique le 26 octobre 2009

Membres du jury

André Thiaville	DR CNRS, Laboratoire de Physique des Solides, Orsay <i>rapporteur</i>
Yurij Holovatch	Directeur de Recherche à l'Institut de la Matière Condensée, Académie des Sciences d'Ukraine, Lviv <i>rapporteur</i>
Hamid Kachkachi	Professeur à l'Université de Perpignan, Laboratoire de Mathématiques, Physique et Systèmes <i>rapporteur</i>
Jean-Marc Luck	Institut de Physique Théorique, CEA Saclay <i>examineur</i>
Denis Ledue	Professeur à l'Université de Rouen, Groupe de Physique des Matériaux <i>examineur</i>

Sommaire

Curriculum Vitae	p. 4
Synthèse des travaux de recherche	p. 5
Introduction	p. 6
Chapitre 1. Généralités sur les transitions de phase et les techniques de simulation numérique	p. 8
<i>Rôle des systèmes modèles pour la description des phénomènes critiques</i>	p. 9
<i>Les méthodes numériques Monte Carlo</i>	p. 11
Chapitre 2. Étude de systèmes modèles désordonnés	p. 14
<i>Introduction</i>	p. 15
<i>Critères de Harris et de Imry et Wortis</i>	p. 16
<i>Les modèles bidimensionnels</i>	p. 17
<i>Les modèles tridimensionnels</i>	p. 25
<i>Conclusion</i>	p. 41
Chapitre 3. Étude de systèmes magnétiques	p. 42
<i>Introduction</i>	p. 43
<i>Propriétés de nanoparticules magnétiques</i>	p. 44
<i>Étude de l'anisotropie magnétique dans les multicouches amorphes Fe/Dy</i>	p. 51
<i>Conclusion</i>	p. 63
Projet de recherche	p. 64
Introduction	p. 65
Propriétés magnétiques de multicouches cristallines	p. 65
<i>Profil d'aimantation dans des super-réseaux DyFe₂/YFe₂</i>	p. 65
<i>Couplage d'échange dans les multicouches [Pt/Co]_n-IrMn</i>	p. 70

Étude d'agrégats ferromagnétiques	p. 72
Bibliographie	p. 74
Liste des travaux	p. 81
Liste de publications	p. 81
Communications dans des congrès	p. 83
Séminaires	p. 87
Activités d'enseignement, de diffusion de la culture scientifique, d'encadrement et d'administration	p. 89
Sélection d'articles	p. 94
(i) <i>Aperiodicity-induced second order phase transition in the 8-state Potts model.</i> P.E. Berche, C. Chatelain and B. Berche, <i>Physical Review Letters</i> 80 (1998) 297-300 http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9711205	p. 95
(ii) <i>Softening of first-order transition in three-dimensions by quenched disorder.</i> C. Chatelain, B. Berche, W. Janke and P.E. Berche, <i>Physical Review E</i> 64 (2001) 036120-036123 http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0103377	p. 99
(iii) <i>Magnetization switching in a ferromagnetic Heisenberg nanoparticle with uniaxial anisotropy: A Monte Carlo investigation.</i> D. Ledue, P.E. Berche and R. Patte, <i>Physica B</i> 348 (2004) 410-419, http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0312536	p. 103
(iv) <i>Bond dilution in the 3D Ising model.</i> P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke, <i>European Physical Journal B</i> 38 (2004) 463-474 http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0402596	p. 113
(v) <i>Magnetization depth profile of (Fe/Dy) multilayers.</i> A. Tamion, F. Ott, P.E. Berche, E. Talbot, C. Bordel and D. Blavette, <i>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</i> 320 (2008) 2650-2659	p. 125
(vi) <i>Monte Carlo investigation of the magnetic anisotropy in Fe/Dy multilayers.</i> E. Talbot, D. Ledue and P.E. Berche, <i>Journal of Applied Physics</i> 106 (2009) 023901-023911	p. 135

Berche Pierre-Emmanuel

Né le 29/04/70 à Nancy

Marié, 2 enfants

Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634

Maître de Conférence à l'Université de Rouen depuis le 01/09/98

Curriculum vitae

1988 Baccalauréat série C (mention AB)

1988-1990 DEUG A, SSM (mention P, juin 1990)

1990-1991 Licence de Physique (mention AB, juin 1991)

1991-1992 Maîtrise de Physique (mention AB, juin 1992)

1992-1993 DEA en *Sciences et Génie des Matériaux* (mention TB, juin 1993)
Admissibilité à l'Agrégation de Sciences Physiques, option Physique

Mars 1993-Sept. 1994 : Service National dans le cadre du service des objecteurs
de conscience

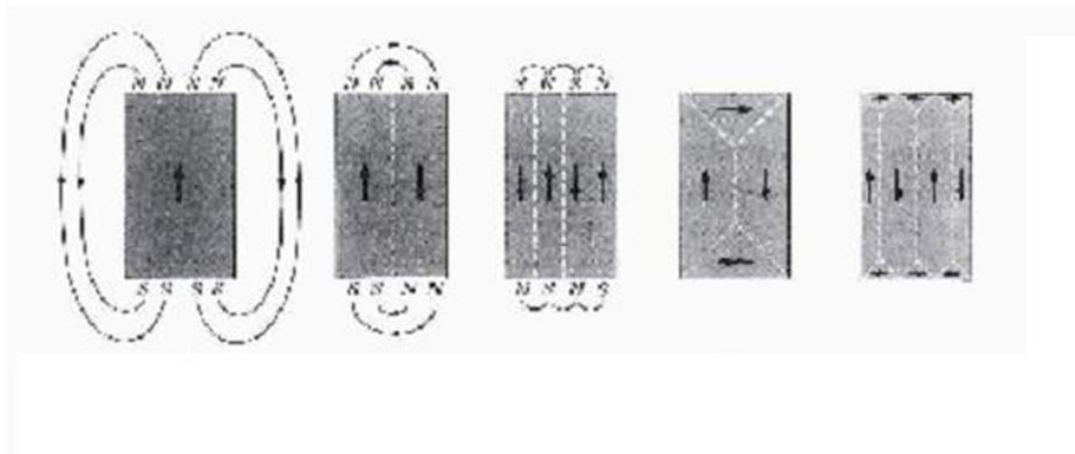
Sept. 1994-Déc. 1996 : Thèse de Doctorat de l'Université Henri Poincaré, Nancy 1
en *Physique et Chimie de la Matière et des Matériaux*
(soutenue à Nancy le 17.12.96, mention TH avec félicitations)
“*Contribution à l'étude des phénomènes critiques dans les
systèmes aperiodiques : séquences marginales de volume.*”
directeur de thèse : Loïc Turban

Oct. 1997-Fév. 1998 : A.T.E.R. (demi-poste) à l'Université Henri Poincaré, Nancy 1

Mars 1998-Sept. 1998 : Stage post-doctoral financé par l'Union Européenne (bourse
Marie Curie) à : *Institut für Physik, Johannes Gutenberg
Universität-Mainz* dirigé par K. Binder
et : *Institut für theoretische Physik, Universität Leipzig* avec
W. Janke

Sept. 1998 : Maître de conférence à l'Université de Rouen

Synthèse des travaux de recherche



Introduction

J'ai soutenu ma thèse en 1996 dans le groupe de physique statistique de Loïc Turban, au Laboratoire de Physique des Matériaux de l'université de Nancy 1. Mon sujet de thèse portait sur l'étude des phénomènes critiques dans le modèle d'Ising bidimensionnel perturbé par des séquences apériodiques. Il s'agissait d'une étude de physique théorique nécessitant l'utilisation de méthodes analytiques et numériques exactes de diagonalisation de matrices. A la suite de ma thèse et en particulier dans le cadre de mon séjour post-doctoral à Mayence et Leipzig avec Wolfhard Janke, je me suis initié aux techniques de simulation numérique intensive Monte Carlo pour l'étude des transitions de phase du premier ordre ou du second ordre dans des systèmes apériodiques ou désordonnés. Suite à mon recrutement en tant que maître de conférence à l'université de Rouen en septembre 1998, j'ai poursuivi, pour une part, cette activité dans le cadre d'un programme de coopération franco-allemand intitulé : *Étude des modèles désordonnés d'Ising et de Potts à 3 dimensions*. La présentation de ces travaux fait l'objet du 2^{ème} chapitre de ce mémoire. D'autre part, j'ai démarré avec Denis Ledue, l'étude et la modélisation des propriétés de systèmes magnétiques nanostructurés. Il s'est agi dans un premier temps de nanoparticules magnétiques dont nous avons étudié le retournement de l'aimantation puis de multicouches Fe/Dy élaborées et caractérisées structuralement et magnétiquement au Groupe de Physique des Matériaux (collaboration avec Alexandre Tamion et Catherine Bordel). Nous avons également engagé l'étude par simulation numérique d'autres types de multicouches comme :

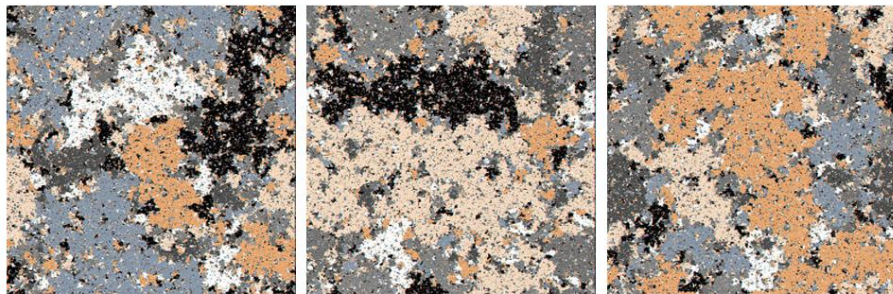
- les super-réseaux épitaxiés DyFe₂/YFe₂ (co-encadrement de la thèse en Algérie de Saoussen Djedaï qui effectue un séjour de 18 mois au Groupe de Physique des Matériaux à compter du mois d'octobre 2009 dans le cadre d'un programme franco-algérien de formation supérieure et collaboration avec Catherine Dufour du Laboratoire de Physique des Matériaux de l'Université Henri Poincaré Nancy 1) ;

- les multicouches IrMn/Co/Pt (collaboration interne au GPM avec Denis Ledue, Rodrigue Lardé et Luc Lechevallier et avec le laboratoire SPINTEC à Grenoble).

Dans ces deux dernières études, il s'agit de nous concentrer sur les problématiques d'anisotropie d'échange et de couplages entre couches ferromagnétiques et antiferromagnétiques qui peuvent induire des décalages de cycles d'hystérésis ou des retournements de l'aimantation sous champ magnétique appliqué selon des processus parfois complexes.

Mon activité de recherche, dont le fil conducteur depuis la fin de ma thèse est l'utilisation de simulations numériques intensives, s'est donc orientée peu à peu vers la modélisation d'échantillons étudiés expérimentalement. Ces dernières années, les objectifs de la recherche dans le domaine des matériaux magnétiques s'orientent principalement vers la description et la compréhension des interactions entre objets magnétiques de dimension typiquement nanométrique (nanoplots, multicouches nanométriques, nanoparticules ...). Un grand nombre de propriétés nouvelles ont été découvertes, en particulier grâce à la réduction de leurs dimensions caractéristiques comme par exemple la magnéto-résistance géante, la magnéto-résistance tunnel ou l'anisotropie magnétique perpendiculaire. Il est donc assez naturel que mes sujets de recherche relèvent désormais de ces problématiques que je détaillerai dans le 3^{ème} chapitre ainsi que dans le projet de recherche présenté en fin de mémoire.

Chapitre 1. Généralités sur les transitions de phase et les techniques de simulation numérique



1. Rôle des systèmes modèles pour la description des phénomènes critiques

L'étude des phénomènes critiques ou transitions de phase du second ordre constitue un sujet d'étude majeur en physique théorique depuis plusieurs décennies que ce soit en physique des particules ou en physique de la matière condensée. En effet, les concepts d'universalité sur lesquels repose l'essentiel des développements récents dans ce domaine s'avèrent particulièrement féconds pour décrire des systèmes a priori très différents. Sur le plan théorique, l'universalité des phénomènes critiques est liée au caractère auto-similaire des configurations des variables en interaction qui permettent de renormaliser celles-ci. Un système critique est alors caractérisé par la disparition de toute échelle de longueur typique entre la distance moyenne entre variables (pas du réseau par exemple) et la taille du système macroscopique. Ce phénomène conduit à la divergence des fluctuations qui s'étendent à toutes les échelles de longueur ce qui conduit à l'invariance par dilatation et à l'apparition d'une forme singulière pour l'énergie libre. Ainsi, même dans le cas où les interactions sont limitées aux premiers voisins, l'information sur l'état d'une variable à une extrémité du système se transmet de proche en proche jusqu'à l'autre extrémité. Le développement de la densité d'énergie libre f sous forme d'une fonction singulière des champs d'échelle $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ où T_c est la température critique et $h = \frac{B}{k_B T_c}$, permet alors de définir les exposants critiques caractérisant le comportement des différentes grandeurs thermodynamiques au voisinage du point critique :

$$C \sim |t|^{-\alpha}, \quad h = 0, \quad (1)$$

$$M \sim (-t)^\beta, \quad t < 0, \quad h = 0, \quad (2)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad h = 0, \quad (3)$$

$$M \sim h^{1/\delta}, \quad t = 0, \quad (4)$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad h = 0, \quad (5)$$

$$G(r) \sim r^{-d+2-\eta}, \quad t = 0, \quad h = 0, \quad (6)$$

où C est la chaleur spécifique, M est le paramètre d'ordre, χ est la susceptibilité, ξ est la longueur de corrélation et $G(r)$ est la fonction de corrélation à 2 points [1-4].

Les exposants critiques décrivent phénoménologiquement le comportement des systèmes composés d'un grand nombre de particules au voisinage du point critique, qui mettent donc en jeu un nombre considérable de degrés de liberté. L'invariance d'échelle permet alors l'utilisation des techniques de renormalisation qui consistent à éliminer progressivement un certain nombre de ces degrés de liberté par des changements d'échelle successifs. Cette méthode, connue sous le nom de **groupe de renormalisation** [5-7], conduit à l'obtention de lois d'échelle entre les exposants critiques [8] :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (7)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2, \quad (8)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta), \quad (9)$$

$$\alpha = 2 - d\nu. \quad (10)$$

Dans cette approche, on comprend que le comportement dominant au point critique des grandeurs physiques ne dépendra pas des détails du système. C'est la raison pour laquelle une même classe d'universalité peut permettre de décrire des phénomènes aussi différents que l'aimantation d'un matériau ferromagnétique, le paramètre d'ordre d'un alliage binaire ou la transition de phase de certains supraconducteurs. Les paramètres essentiels permettant de définir une classe d'universalité seront alors la dimension de l'espace, la dimensionalité du paramètre d'ordre, la portée des interactions. C'est pourquoi les modèles de variables en interaction les plus simples jouent un rôle aussi important dans l'étude des phénomènes critiques. Nous allons définir rapidement quelques uns de ces modèles auxquels nous aurons recours par la suite.

Le plus célèbre et le plus simple est le modèle d'Ising [9] défini à partir des variables de spin $\sigma_i = \pm 1$ situées sur les sites i d'un réseau et dont le hamiltonien est :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i, \quad (11)$$

où B est le champ magnétique appliqué, J est le couplage d'échange, limité en général aux paires de premiers voisins. Les exemples de systèmes réels décrits par le modèle d'Ising bidimensionnel sont nombreux, dans différents domaines, comme par exemple les fluides binaires, les alliages ou des aimants uniaxes [4,10].

Une généralisation importante du modèle d'Ising a été introduite avec le modèle de Potts en 1951 [11]. Sur chaque site se trouve une variable σ qui peut prendre q valeurs différentes, par exemple, $\sigma = 0, 1, \dots, q-1$. Le hamiltonien est défini par :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j}, \quad (12)$$

où la somme concerne uniquement les premiers voisins. Le modèle d'Ising correspond alors au cas particulier $q = 2$. La transition de phase du modèle de Potts bidimensionnel est du premier ordre lorsque $q > 4$ et du second ordre lorsque $q \leq 4$. A 3 dimensions, elle est du premier ordre dès que $q > 2$. Des réalisations concrètes du modèle de Potts bidimensionnel à 3 ou 4 états sont obtenues pour des transitions liquide-vapeur ou de chemisorption et de reconstruction de surface [12-18].

Une autre famille importante de modèles abondamment étudiés en physique statistique est celle des modèles XY et de Heisenberg. Le modèle XY classique est défini par le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (13)$$

où les variables de spins θ_i varient continûment dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. Un très grand nombre de systèmes physiques réels peuvent être décrits par le modèle XY, par exemple des superfluides, des supraconducteurs, la mise en ordre dans les cristaux liquides ou la transition rugueuse [19,20]. La transition de la phase désordonnée à la phase ordonnée

est décrite en termes de vortex libres dans la phase haute température et de vortex liés dans la phase basse température [21,22]. Le modèle XY peut également être défini à partir de spins vectoriels à 2 dimensions $\mathbf{S}_i$ de valeur absolue $\mathbf{S}_i^2 = 1$:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (14)$$

Si l'on considère des spins vectoriels tridimensionnels, on obtient le modèle classique de Heisenberg. Dans le cas des films minces, l'anisotropie de surface est susceptible de stabiliser l'ordre à grande distance à des températures finies. Par exemple, pour des films minces avec une symétrie cubique, s'il existe une anisotropie uniaxiale, perpendiculaire ou parallèle au plan du film, la transition sera dans la classe d'universalité du modèle d'Ising $2d$ [23]. S'il n'y a pas d'anisotropie de surface uniaxiale, l'aimantation est dans le plan du film. Le comportement critique peut alors dépendre des champs cristallins à l'intérieur du plan et conduire éventuellement à un comportement critique non universel comme pour le modèle XY [24].

2. Les méthodes numériques Monte Carlo

Les méthodes Monte Carlo sont des méthodes stochastiques qui sont basées sur le principe des chaînes de Markov. Cette méthode consiste à générer une suite de n configurations $(X_1, \dots, X_n)$ pour laquelle la densité de probabilité $P_n(X)$ converge vers une densité d'équilibre $P(X)$. Dans notre cas, chaque configuration X est un élément de l'espace des phases Ω et correspond à un ensemble de N spins $X = (\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_i, \dots, \mathbf{S}_N)$. La probabilité de transition $W(X \rightarrow X')$ de l'état X vers l'état X' doit satisfaire la relation appelée *condition de stationnarité* :

$$\forall X', X \in \Omega, \sum_{X'} W(X', X) P(X') = \sum_X W(X, X') P(X). \quad (15)$$

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

$$W(X', X) P(X') = W(X, X') P(X). \quad (16)$$

2.1 Algorithme de Metropolis

L'algorithme de Metropolis est l'algorithme "standard" de la méthode Monte Carlo dans l'ensemble canonique [25]. La distribution de probabilité à l'équilibre à la température T est définie par :

$$P_T(X) = \frac{e^{-E(X)/k_B T}}{\sum_X e^{-E(X)/k_B T}}, \quad (17)$$

et la condition de réversibilité microscopique conduit à :

$$\frac{W(X \rightarrow X')}{W(X' \rightarrow X)} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right), \quad (18)$$

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

$$X = (\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_i, \dots, \mathbf{S}_N) \longrightarrow X' = (\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}'_i, \dots, \mathbf{S}_N). \quad (19)$$

Le choix de Metropolis *et al.* consiste à prendre $W(X \rightarrow X') = \min \left\{ 1, \exp \left(-\frac{\Delta E}{k_B T} \right) \right\}$ qui vérifie la relation (18).

2.2 Algorithmes d'amas

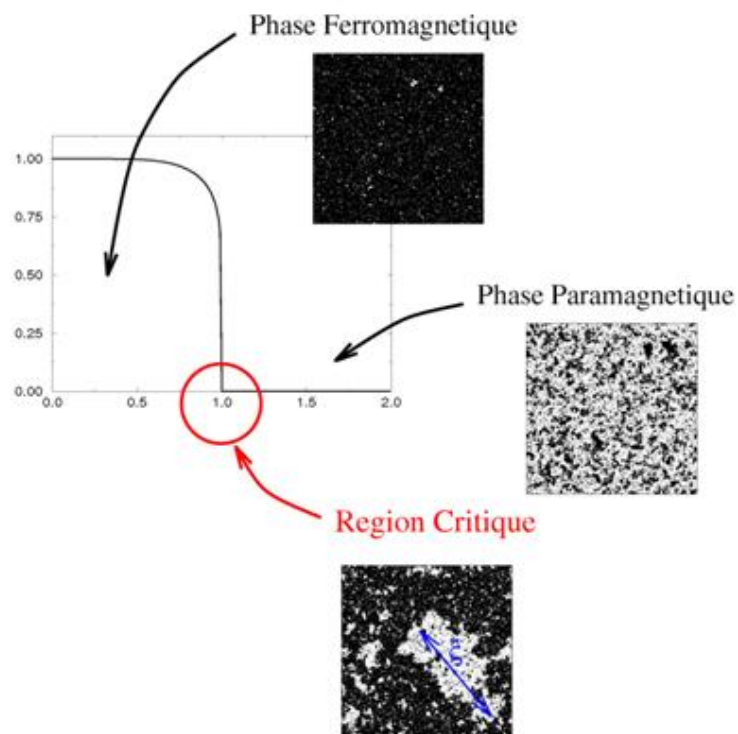
Dans le domaine des simulations Monte Carlo sur les systèmes de spins au point critique, les algorithmes classiques utilisant des règles d'itérations locales (comme celui de Metropolis) souffrent d'inconvénients majeurs liés au *ralentissement critique* qui interdisent leur emploi pour des simulations intensives sur des systèmes de grande taille en raison de contraintes de temps de calcul. Pour une transition du second ordre, le phénomène de ralentissement critique provient de la divergence de la longueur de corrélation au voisinage du point critique, ce qui provoque également une divergence de la taille des amas de spins corrélés qui devient comparable à celle du système lui-même. Les algorithmes ont été considérablement améliorés ces dernières années, notamment grâce aux algorithmes d'itérations non locales d'amas (algorithmes de Swendsen-Wang [26] et de Wolff [27,28]). Pour les transitions du premier ordre, il existe un *super ralentissement critique* lié aux configurations exponentiellement rares, mais cet obstacle peut être en grande partie levé grâce à l'utilisation des algorithmes multicanoniques [29-32]. L'emploi de ces techniques est indispensable pour étudier un système désordonné susceptible de présenter des régimes du premier et du second ordre en fonction de la concentration en impuretés, tel que celui que nous avons étudié (modèle de Potts tridimensionnel désordonné - chapitre 2). D'autre part, la nécessité d'effectuer des moyennes sur un grand nombre de configurations (typiquement de l'ordre du millier) rend le problème particulièrement bien adapté au calcul parallèle puisqu'il suffit dans ce cas de répartir entre les processeurs les différentes configurations de désordre. Nous avons donc mis à profit les nombreux processeurs des centres de calcul nationaux (CINES, Centre de calcul de Jülich) ou régionaux (CRIHAN, Centre de calcul de l'université de Leipzig) afin de mener à bien l'ensemble de cette étude.

2.3 Méthode Monte Carlo quantifiée en temps

Il s'agit d'une méthode de simulation qui a été élaborée afin d'étudier le temps de relaxation d'un moment magnétique en présence d'un champ magnétique. Elle a été utilisée dans le cadre de l'étude du phénomène de nucléation basé sur le modèle d'Ising [33], pour la détermination de cycles d'hystérésis dans le cas de matériaux présentant des propriétés magnéto-optiques [34] ou pour des systèmes de spins en interaction [35,36]. Cette technique de simulation numérique, fondée au départ sur une idée de Binder [37] puis développée par Nowak *et al.* [38-40], permet l'étude de la dynamique du retournement de l'aimantation et donc la simulation de cycles d'hystérésis contrairement

aux simulations Monte Carlo basées sur l'algorithme de Metropolis qui ne permettent pas de reproduire la dynamique du retournement à basse température en particulier. De surcroît, elle permet dans certains cas de donner une correspondance entre un pas Monte Carlo et le temps physique. Il s'agit donc de proposer des essais de rotation des spins d'un angle faible autour de leur direction initiale à l'intérieur d'un cône d'angle d'ouverture relativement petit, fonction de la température de mesure. Nous utiliserons cette technique de simulation pour l'étude des propriétés dynamiques des systèmes magnétiques nanostructurés (chapitre 3).

Chapitre 2. Étude de systèmes modèles désordonnés



1. Introduction

Comme nous l'avons mentionné précédemment, la robustesse de la théorie des phénomènes critiques repose sur les concepts d'universalité qui supposent que les détails d'un modèle n'influencent que de façon marginale le comportement critique de celui-ci. Assez naturellement, on est alors amené à s'interroger sur le rôle du désordre - ou des impuretés dans le cas des situations expérimentales - sur les phénomènes critiques. Ainsi, depuis les années 1970, différents types de désordres ou de perturbations ont été envisagés afin de comprendre pourquoi dans certaines situations, un nouveau comportement critique émerge alors que dans d'autres, le comportement critique demeure inchangé [41]. Afin de mettre en évidence ce phénomène, dans certaines expériences, des impuretés non magnétiques sont introduites de façon contrôlée [42]. La figure 1 en présente un exemple avec le composé magnétique $\text{Mn}_{0,75}\text{Zn}_{0,25}\text{F}_2$ dont le comportement critique est gouverné par le point fixe du modèle d'Ising tridimensionnel désordonné ($\gamma = 1,364(76)$) alors que l'exposant critique du modèle pur est $\gamma = 1,2396(13)$.

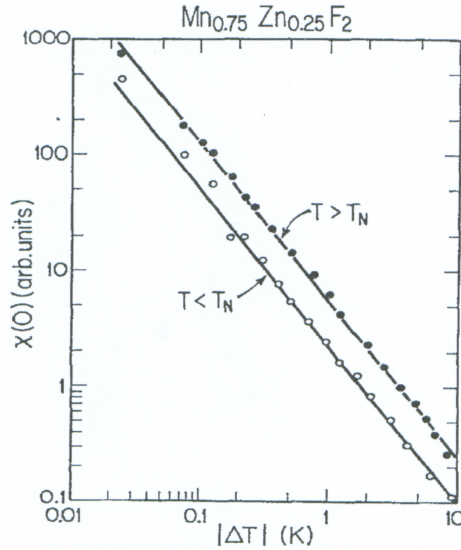


Figure 1. Mesures par diffusion de neutrons de la susceptibilité magnétique du composé $\text{Mn}_{0,75}\text{Zn}_{0,25}\text{F}_2$ au voisinage du point critique gouverné par le point fixe désordonné du modèle d'Ising. Les courbes continues correspondent à un ajustement en loi de puissance avec l'exposant $\gamma = 1.364(76)$ au-dessus et en-dessous de la température critique T_N [42].

L'influence du désordre trempé sur les transitions de phase à 2 dimensions a été abondamment étudiée dans les dernières années avec différentes méthodes. Ainsi, des prévisions analytiques [43-51], des calculs par matrice de transfert [52-56], des simulations Monte Carlo [57-67] et des calculs de séries à haute température [68,69] ont été menés de façon complémentaire et ont permis d'obtenir une description cohérente.

Malgré cela subsistent encore quelques questions essentielles (par exemple le problème d'une variation brutale ou continue des exposants critiques ou celui d'une universalité faible dans le cas du modèle d'Ising) qui sont toujours controversées [70-76]. Des questions plus spécifiques sont encore également en débat, telles que le comportement auto-moyennant des grandeurs thermodynamiques [77-79] ou leur caractère multifractal [80-82] et sont encore à l'étude. A 3 dimensions, la situation est naturellement moins bien connue. Les méthodes analytiques sont cette fois moins efficaces, en particulier les calculs perturbatifs au voisinage de théories conformes sont exclus, de même que les calculs par matrice de transfert, trop lourds à mettre en œuvre. Les simulations Monte Carlo ont été utilisées jusqu'à récemment seulement pour le désordre de site dans le cas du modèle d'Ising [77-79]. Comme on l'attend d'après le critère de Harris qui sera présenté dans la section suivante, ces dernières études apportent des éléments en faveur d'une nouvelle classe d'universalité. Les valeurs des exposants critiques sont cependant très controversées. Les analyses de séries à haute température sont insuffisantes pour pouvoir en tirer une conclusion fiable. Dans le cas du désordre de liaison, aucune étude par simulation Monte Carlo n'avait été menée avant notre travail (paragraphe 4.1). Même pour une transition de phase du 2nd ordre, obtenue pour le modèle relativement simple d'Ising, subsiste encore la question de savoir si les deux types de désordre trempé (désordre de site et désordre de liaison) conduisent à la même classe d'universalité.

2. Critères de Harris et de Imry et Wortis

L'existence de défauts dans les systèmes réels est généralement modélisée sous la forme d'interactions aléatoires ("random bond") dans les systèmes de spins ou d'impuretés non magnétiques diluées ("dilute magnets"). La présence d'impuretés tend à désordonner le système et à abaisser sa température critique. Le critère de Harris permet de prévoir qualitativement l'influence d'un tel désordre au voisinage d'une transition du second ordre à partir des exposants critiques du système pur de référence [83-86]. L'exposant α de la chaleur spécifique joue le rôle de dimension d'échelle associée au désordre, de sorte que le comportement critique du système est inchangé si $\alpha < 0$, alors que le désordre intervient comme une perturbation pertinente si $\alpha > 0$.

L'influence des impuretés sur les transitions du premier ordre a également des effets importants. La longueur de corrélation restant finie au voisinage d'une transition de phase du premier ordre, aucun comportement universel n'est attendu. La question de savoir si la longueur de cohérence peut devenir suffisamment importante pour "moyenner" les inhomogénéités et produire une transition brutale, analogue à celle du système pur, ou si les phases ordonnées à basse température et les interfaces entre elles peuvent être éliminées par les fluctuations, a été abordée par Imry et Ma dans le cas des champs aléatoires [87,88]. A partir d'un argument analogue à celui de Harris, Imry et Wortis ont montré que la présence d'impuretés peut induire une transition du second

ordre dans un système qui, pur, présente une transition du premier ordre [89-93].

3. Les modèles bidimensionnels

3.1 Le modèle d'Ising

Au cours de ma thèse, j'ai étudié les perturbations aperiodiques - non périodiques mais déterministes - du modèle d'Ising bidimensionnel [94-96] (pour une revue de l'ensemble des travaux effectués dans ce cadre, voir la référence [97]). Cette étude a été menée dans la limite hamiltonienne, ce qui correspond au modèle de chaîne d'Ising quantique. Cette limite permet le calcul des grandeurs physiques à partir de méthodes numériques exactes par la diagonalisation de matrices de dimension L^2 où L est la dimension linéaire du système étudié. Dans le cas des perturbations aperiodiques en couches, le critère de Harris est alors remplacé par le critère de Luck [98] et l'intérêt des perturbations aperiodiques est que l'on peut contrôler le degré de pertinence de la perturbation aperiodique étudiée - c'est-à-dire son influence qualitative - par le choix de son exposant de divagation ω . La motivation pour l'étude des systèmes aperiodiques provient de la découverte des quasi-cristaux [99] puisque les distributions quasi-périodiques ou aperiodiques des couplages d'échange peuvent constituer une forme différente de perturbation que le désordre gelé de liaisons. Ainsi, si l'on considère une séquence de chiffres $f_k = 0$ ou 1 obtenue à partir de règles de substitution à 2 chiffres

$$1 \rightarrow S(1) = 10, 0 \rightarrow S(0) = 11, \quad (20)$$

on obtient, par itérations successives, une séquence de chiffres $\{f_k\} = 1011101\dots$ auxquels on associe des interactions entre spins $J_0 = J$ et $J_1 = Jr$ (figure 2).

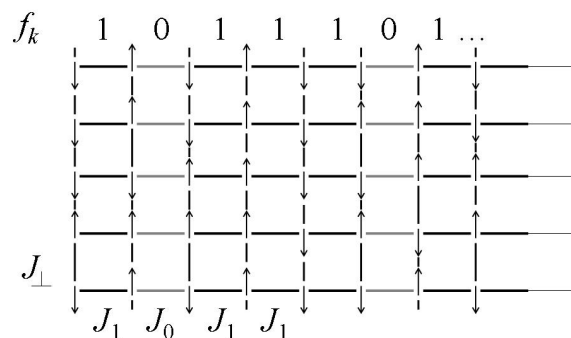


Figure 2. Représentation schématique du modèle d'Ising bidimensionnel en couches perturbé par la séquence aperiodique de Period-Doubling.

La plupart des propriétés d'une telle séquence peuvent être caractérisées par une

matrice de substitution dont les éléments M_{ij} sont donnés par les nombres $n_i^{S(j)}$ d'occurrence des chiffres i dans la substitution $S(j)$ [100]. La plus grande valeur propre de la matrice de substitution est reliée à la longueur de la séquence après n itérations, $L_n \sim \Lambda_1^n$, tandis que la seconde valeur propre Λ_2 gouverne le comportement asymptotique de la déviation cumulée à la densité asymptotique $\rho_\infty = \bar{f}_k$:

$$\sum_{k=1}^L (f_k - \rho_\infty) \sim |\Lambda_2|^n \sim (\Lambda_1^\omega)^n, \quad (21)$$

où l'exposant de divagation ω [101] est défini par :

$$\omega = \frac{\ln |\Lambda_2|}{\ln \Lambda_1}. \quad (22)$$

L'exposant de *cross-over* ϕ qui gouverne la pertinence de la séquence apériodique est alors défini par :

$$\phi = 1 + \nu(\omega - 1) = \omega, \quad (23)$$

puisque $\nu = 1$ dans le cas du modèle d'Ising bidimensionnel. En effet, les fluctuations des couplages d'échange par liaison à l'échelle de la longueur de corrélation ξ entraînent une perturbation thermique $\langle \delta t \rangle \sim t^{-\nu(\omega-1)}$, qui doit être comparée à l'écart au point critique t ($t = |T - T_c|/T_c$). La perturbation résultante est donc caractérisée par un exposant de *cross-over* ϕ , et est pertinente si $\phi > 0$.

A titre d'exemple, la séquence apériodique définie précédemment, appelée *Period-Doubling* [102,103] a un exposant de divagation ω qui est nul. On parle alors de perturbation marginale pour laquelle on observe une variation continue des exposants critiques avec l'amplitude r de la perturbation [104]. La séquence de *Thue-Morse* [105], définie par :

$$0 \rightarrow S(0) = 01, \quad 1 \rightarrow S(1) = 10, \quad (24)$$

est caractérisée par un exposant de divagation $\omega = -\infty$. Cette perturbation ne modifie donc pas les propriétés critiques du modèle d'Ising à 2 dimensions et seules des quantités non universelles comme par exemple la température critique pourront être affectées [104,106]. Enfin, les séquences dont l'exposant de divagation est positif comme celle de *Rudin-Shapiro* [102,105] par exemple ($\omega = 1/2$) :

$$00 \rightarrow 0001, \quad 01 \rightarrow 0010, \quad 10 \rightarrow 1101, \quad 11 \rightarrow 1110, \quad (25)$$

induisent un changement brutal de comportement critique. On parle alors de perturbation pertinente qui peut conduire au remplacement du comportement en loi de puissance des propriétés physiques par des discontinuités ou des exponentielles décroissantes [104,107].

3.2. Le modèle de Potts

Le modèle de Potts à 2 dimensions présente, dans sa version non perturbée, une transition du second ordre lorsque $q \leq 4$ et une transition du premier ordre si $q > 4$

[11], transition d'autant plus marquée que q est grand. De ce fait, il constitue un exemple idéal pour tester l'influence de perturbations aperiodiques ou désordonnées sur une transition de phase du premier ordre. Chen, Ferrenberg et Landau ont, les premiers, montré que la transition est adoucie en une transition du second ordre en présence d'un désordre de liaison et ils ont obtenu des exposants critiques très proches de ceux du modèle d'Ising bidimensionnel pur [57]. Depuis, différents résultats obtenus dans le cadre de travaux indépendants ont confirmé la nature continue de la transition de phase en présence de désordre (même pour une concentration infinitésimale d'interactions modifiées) mais dans le cadre d'une nouvelle classe d'universalité [53,58,59].

L'influence de distributions quasi-périodiques ou aperiodiques des couplages d'échange sur des transitions de phase du premier ordre n'a été abordée que dans un second temps. Il a en particulier été montré que la transition demeure du premier ordre dans le cas du modèle de Potts à 8 états sur un réseau quasi-périodique [108]. Le critère de Luck trouve sa justification au point critique, c'est-à-dire lorsque la longueur de corrélation du système pur diverge à l'approche du point de transition. La question de son application dans le cas d'une transition du premier ordre n'est donc pas évidente a priori.

Pour ce qui nous concerne, nous avons étudié l'influence de différentes perturbations aperiodiques sur le modèle de Potts à 8 états [109,110] au moyen de simulations Monte Carlo intensives.

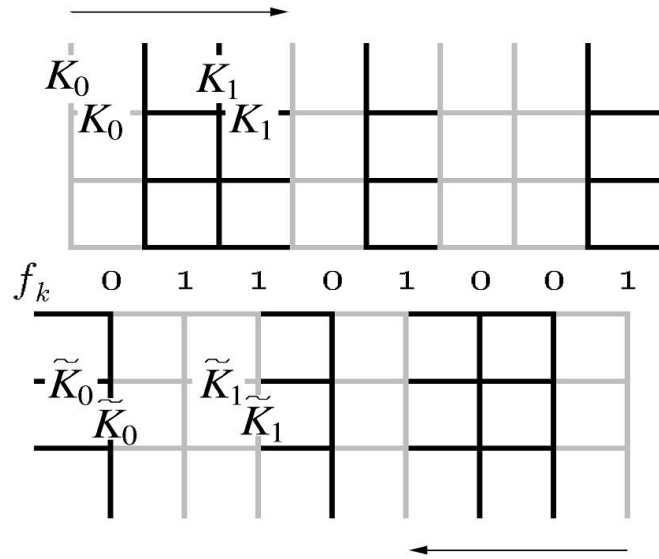


Figure 3. Représentation schématique de la structure en couches de la distribution aperiodique des couplages du réseau et sa transformation par dualité.

Il s'agit d'un modèle en couches (figure 3) dont le hamiltonien peut s'écrire sous la forme suivante :

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (26)$$

où les spins σ_i , localisés sur les sites i , peuvent prendre les valeurs $\sigma = 1, 2, \dots, q$. La somme concerne les plus proches voisins et les couplages d'échange peuvent prendre deux valeurs différentes $K_0 = K$ et $K_1 = Kr$. Les couplages sont distribués selon une structure en couches, c'est-à-dire que la distribution est invariante par translation dans une direction du réseau et suit une modulation aperiodique f_k dans l'autre direction : dans la couche k , à la fois les couplages horizontaux et verticaux prennent la même valeur Kr^{f_k} . Cette structure en couches est très clairement visualisée par la forme des amas corrélés obtenus en simulation Monte Carlo (figure 4).

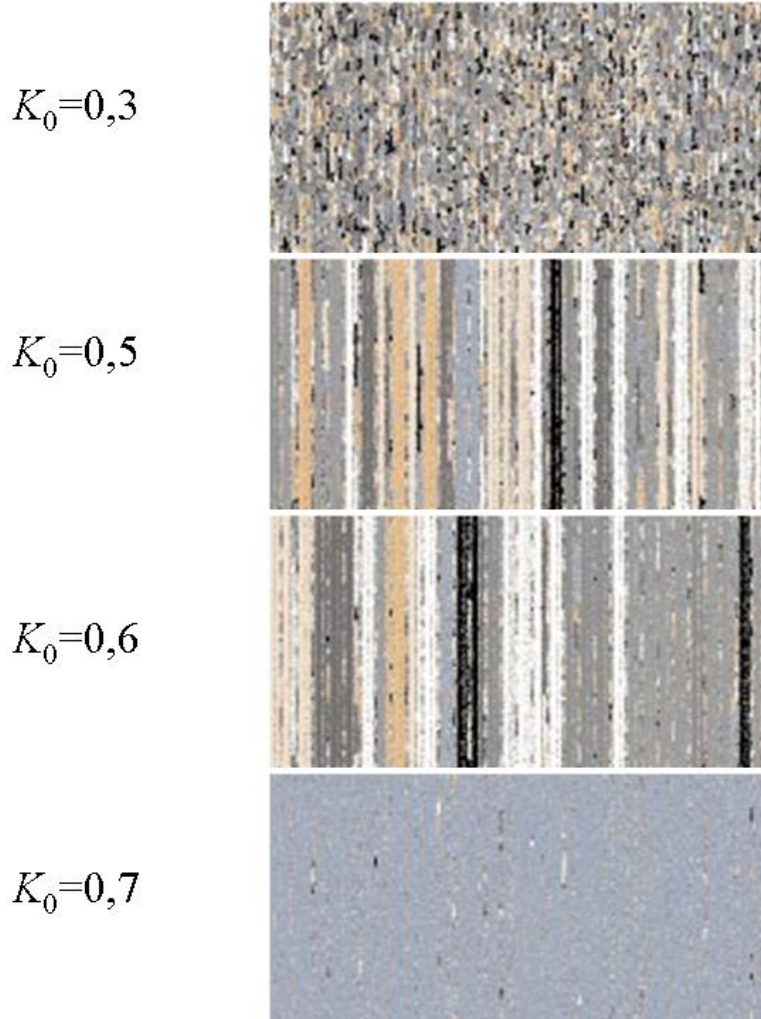


Figure 4. Configurations Monte Carlo typiques pour un système de taille 256×512 dans la phase haute température ($K_0 = 0,3$), au voisinage du point critique ($K_0 = 0,5$ et $K_0 = 0,6$) et dans la phase de basse température ($K_0 = 0,7$). La structure en couches du modèle est clairement visible.

Le choix particulier de certaines distributions de couplages permet de localiser exactement le point critique en utilisant les arguments de dualité [109] qui permettent d'exprimer le couplage critique K_c à partir de la ligne critique du modèle anisotrope

habituel [111,112] :

$$(e^{K_c} - 1)(e^{K_{cr}} - 1) = q. \quad (27)$$

Nous avons examiné l'influence de 3 séquences apériodiques différentes ainsi que le cas du système périodique (PS) avec une succession régulière de couplages $K_1, K_0, K_1, K_0, \dots$, pour lequel la transition est indubitablement du premier ordre. Ce système constitue une référence pour le comportement de type premier ordre et présente l'avantage d'avoir la même valeur de couplage critique (pour une valeur de r fixée) que les séquences apériodiques considérées.

Les séquences apériodiques étudiées sont les suivantes :

$$\text{Thue-Morse (TM)} : 0 \rightarrow 01, 1 \rightarrow 10, \quad \omega_{\text{TM}} = -\infty, \quad (28)$$

$$\text{Paper-Folding (PF)} : 00 \rightarrow 1000, 01 \rightarrow 1001, 10 \rightarrow 1100, 11 \rightarrow 1101, \quad \omega_{\text{PF}} = 0, \quad (29)$$

$$\text{Three-Folding (TF)} : 0 \rightarrow 010, 1 \rightarrow 011, \quad \omega_{\text{TF}} = 0. \quad (30)$$

Les simulations Monte Carlo par effets de taille finie au point critique ont été réalisées sur des réseaux de dimensions $L \times 4L$ (PF, TM, PS) ou $L \times 3L$ (TF) en utilisant l'algorithme d'amas de Swendsen-Wang [26]. Dans notre modèle, l'invariance par translation est vérifiée dans la direction verticale.

L'étude en température (hors point critique) à partir du calcul de l'aimantation, de la susceptibilité et du cumulant de Binder de l'aimantation permet de montrer qualitativement que la transition demeure du premier ordre pour la séquence TM alors qu'elle est fortement adoucie dans le cas de la séquence PF [110]. Sur le plan numérique, il est bien établi qu'il est difficile, à partir de données de simulations Monte Carlo, d'observer un saut du paramètre d'ordre au point de transition pour une transition du premier ordre et, de façon analogue, le comportement de type pic- δ de la susceptibilité ne peut pas facilement être distingué d'une pure loi de puissance. C'est la raison pour laquelle nous avons également calculé le cumulant de Binder de l'aimantation [113]. D'un point de vue qualitatif, on a observé que le cumulant présente, dans le cas de la séquence TM, un pic étroit au voisinage du point de transition qui devient de plus en plus profond lorsque la taille du système augmente. C'est vraisemblablement la signature d'une transition de phase du premier ordre. En revanche, dans le cas des séquences PF et TF, il n'y a pas de tendance analogue.

Les conjectures précédentes sur la nature de la transition doivent être confirmées à partir d'une analyse par effets de taille finie. Dans le cadre des simulations Monte Carlo, le comportement du temps d'autocorrélation de l'énergie τ_e constitue un bon critère pour connaître l'ordre de la transition [114,115]. Nos simulations ont été systématiquement réalisées de telle sorte que le nombre de pas Monte Carlo soit toujours de l'ordre de $10^4 \tau_e$ afin d'obtenir des résultats significatifs. La variation du temps d'autocorrélation en fonction de la taille du système est représentée avec une échelle semi-logarithmique sur la figure 5.

Les données numériques pour les séquences PF et TF peuvent être ajustées par une loi de puissance $\tau_e \sim L^z$ avec un exposant dynamique très petit, vraisemblablement

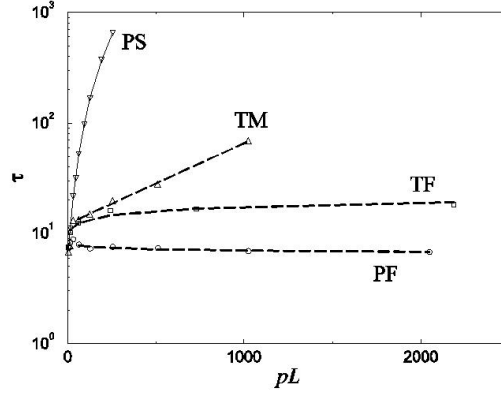


Figure 5. Logarithme du temps d'autocorrélation de l'énergie τ_e à K_c en fonction de la taille du système (pour une amplitude de perturbation $r = 5$). Pour la séquence TM, la ligne pointillée est un ajustement exponentiel alors qu'il s'agit d'un ajustement en loi de puissance pour les séquences PF ($z \sim -0,04$) et TF ($z \sim 0,12$). Les données relatives au système périodique (PS) n'ont pas été ajustées.

lié à un comportement logarithmique tandis que dans le cas de la séquence TM, τ_e diverge exponentiellement selon une loi $\tau_e \sim L^{d/2} e^{2\sigma_{o.d.} L^{d-1}}$ où $\sigma_{o.d.}$ représente une tension d'interface ordre-désordre. Ces résultats confortent fortement l'hypothèse que pour les séquences PF et TF, les fluctuations sont suffisamment importantes pour adoucir la transition vers un régime du second ordre. Dans le cas de la séquence TM, même si le temps d'autocorrélation est diminué par rapport au cas périodique, la transition demeure néanmoins du premier ordre.

Par la suite, nous avons procédé à une caractérisation plus fine de la transition de phase dans les deux régimes. Comme le point critique est connu exactement, les techniques d'effets de taille finie sont tout-à-fait adaptées pour obtenir des résultats précis. Les grandeurs physiques telles que l'aimantation ou la susceptibilité magnétique se comportent en fonction de la taille au point critique de la façon suivante :

$$M(K_c, L) = \mathcal{A}_M L^{-\beta/\nu}, \quad (31)$$

$$\chi(K_c, L) = \mathcal{A}_\chi L^{\gamma/\nu}, \quad (32)$$

où $\mathcal{A}_M$ et $\mathcal{A}_\chi$ sont des amplitudes critiques non universelles. Il est également possible, à partir de séries de simulations numériques avec conditions de bords libres ou fixes, d'extraire les contributions régulières de la densité d'énergie libre [110]. Ainsi, on peut également déterminer le comportement par effets de taille finie de la différence de densité d'énergie $\Delta E(K_c, L)$ qui peut s'écrire :

$$\Delta E(K_c, L) = \mathcal{A}_E L^{(\alpha-1)/\nu}, \quad (33)$$

où $\mathcal{A}_E$ est à nouveau une amplitude critique non universelle. Les dimensions d'échelle $-\beta/\nu$, γ/ν et $(\alpha-1)/\nu$ peuvent être déduites de tracés logarithmiques de ces différentes quantités en fonction de la taille du système. Nous les avons représentées sur la figure 6 en fonction de $1/L_{\min}$, l'inverse de la taille minimum intervenant dans l'ajustement en loi de puissance. Ce mode de représentation permet de dégager une tendance vers le comportement asymptotique attendu. Dans le cas de la séquence TM, un changement de comportement (*cross-over*) apparaît, lorsque la taille augmente, vers un comportement qui ressemble à celui du système périodique, caractérisé par un exposant de l'aimantation qui s'annule ($\beta/\nu \rightarrow 0$ lorsque $1/L_{\min} \rightarrow 0$). De même, dans la limite asymptotique, l'exposant γ/ν associé à la susceptibilité magnétique s'approche de la valeur $d = 2$.

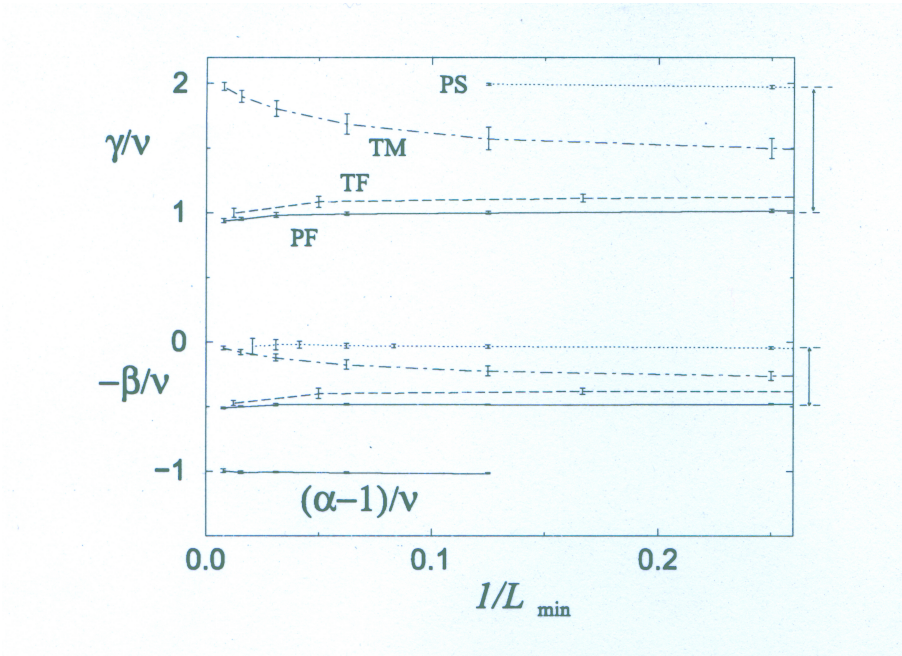


Figure 6. Exposants effectifs dépendant de la taille associés à la susceptibilité, l'aimantation et la différence de densité d'énergie (en pointillés, le système périodique (PS), en points-tirets, la séquence TM, en tirets longs, la séquence TF et en trait continu, la séquence PF) pour $r = 5$. Les flèches sur la droite de la figure indiquent la séparation entre les courbes de γ/ν et de $-\beta/\nu$.

Dans le cas des séquences PF et TF, on observe un comportement très différent avec une convergence a priori vers les exposants $\gamma/\nu \sim 1$ et $\beta/\nu \sim 0,5$. De façon plus précise, on peut en déduire les dimensions d'échelle associées à la température et au champ magnétique $y_t = d - (1 - \alpha)/\nu \approx 1,00$ et $y_h = d - (\beta/\nu) = (d + \gamma/\nu)/2 \approx 1,50$ au nouveau point fixe pour les séquences PF et TF.

On peut finalement se poser la question de savoir si l'on a déterminé, au cours de cette étude où nous avons fait varier l'amplitude de la perturbation apériodique r pour chacune des séquences, un effet de changement de comportement critique (*cross-over*) ou une variation marginale des exposants critiques des séquences PF et TF comme c'est

le cas pour le modèle d'Ising bidimensionnel ($q = 2$). Par comparaison des valeurs numériques des exposants critiques obtenues dans ces deux situations [110], il apparaît clairement qu'une variation avec l'amplitude de la perturbation des exposants critiques dans le cas d'une perturbation marginale est numériquement détectable, sans aucune ambiguïté possible et que la faible dépendance des exposants relevée ici en fonction de l'amplitude de la perturbation est due aux effets de *cross-over* pour de petites tailles, ce que l'on peut illustrer qualitativement par la figure 7. Lorsque la taille du système augmente, les exposants critiques déterminés numériquement évoluent progressivement vers la valeur correspondant au point fixe associé, de façon différente selon l'amplitude de la perturbation r mais néanmoins vers la même valeur asymptotique.

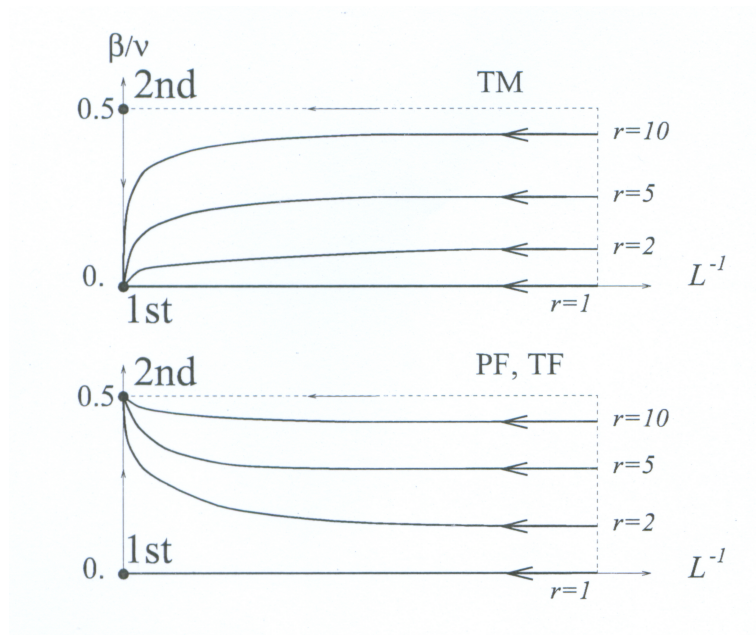


Figure 7. Evolution de l'exposant effectif β/ν en fonction de l'inverse de la taille du système pour différentes amplitudes r de perturbations et différentes séquences aperiodiques.

Ces différents résultats sont en accord avec le critère de Luck à la condition de remplacer l'exposant critique associé à la longueur de corrélation ν par $1/y_t = 1/d$ dans le cas d'un point fixe du premier ordre. L'exposant de *cross-over* associé à la distribution aperiodique $\phi = 1 + (\omega - 1)/d$ est alors positif pour les séquences PF et TF, ce qui correspond à une perturbation pertinente, alors qu'il est négatif pour la séquence TM (non pertinente). L'analyse des propriétés de volume montre que les exposants critiques au nouveau point fixe (PF et TF) sont stables, c'est-à-dire ne dépendent pas, aux effets de *cross-over* près, de la valeur de l'amplitude de la perturbation.

4. Les modèles tridimensionnels

4.1 Introduction

Les modèles tridimensionnels ont naturellement fait l'objet d'une attention soutenue à la suite des modèles à 2 dimensions. Leur étude nécessite cependant un effort sur le plan des simulations numériques sans aucune commune mesure. Par exemple, l'étude présentée ici des modèles tridimensionnels désordonnés d'Ising et de Potts à 4 états aura nécessité un nombre d'heures de calcul monoprocesseur (CPU) évalué à environ 200 000 sur 4 ans, ce qui correspond à l'utilisation ininterrompue d'un processeur pendant plus de 25 ans.

Par ailleurs, même un modèle aussi simple que celui d'Ising ne connaît pas de solution analytique à 3 dimensions et son étude, a fortiori sous forme désordonnée, nécessite impérativement l'utilisation des simulations numériques. La méthodologie adoptée, qui consiste en des simulations Monte Carlo avec l'algorithme d'amas et la méthode multicanonique, a déjà été testée avec succès pour des modèles semblables dans de nombreux travaux [116-118].

Les résultats théoriques, sur ces modèles, sont relativement peu nombreux. La plupart des études basées sur le groupe de renormalisation et les simulations numériques se sont concentrées sur le modèle d'Ising [74,119] considérant un désordre de site pour ce qui concerne les études numériques. Ce n'est que plus récemment que le modèle de Potts à 3 états avec un désordre de site [120], modèle qui présente une transition de phase faiblement du premier ordre dans le cas pur, a été également étudié. Cela nous a conduit à mener une étude systématique par simulation numérique Monte Carlo du modèle de Potts tridimensionnel à 4 états avec un désordre de liaison [121-124] ainsi que du modèle d'Ising [125,126]. Cette étude s'est inscrite globalement dans le cadre d'une collaboration entre les laboratoires de Rouen, Nancy et Leipzig, bénéficiant du soutien des centres de calcul suivants : *CRIHAN*, *CINES*, *Centre de Calcul de l'Université de Leipzig*, *John von Neumann Institute for Computing (NIC) à Jülich* ainsi que d'un support financier du Ministère des Affaires Etrangères (Programme d'Action Intégrée PROCOPE Rouen-Nancy-Leipzig 2000-2002).

Comme la transition de phase du premier ordre du modèle de Potts pur est plus forte pour $q = 4$ que pour $q = 3$, on s'attend à ce que notre choix conduise à une caractérisation plus nette de l'existence d'un point tricritique entre les régimes du premier et du second ordre. Le fait d'étudier le désordre de liaison nous permet de tester l'universalité par rapport à la distribution de désordre et permet également une comparaison quantitative avec des résultats obtenus par des développements en série à haute température [127-129]. Pour les deux modèles étudiés, nous définissons globalement le hamiltonien du modèle de Potts tridimensionnel à q états ($q = 2$ dans le

cas du modèle d'Ising) avec un désordre de liaison :

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad \sigma_i = 1, \dots, q, \quad (34)$$

où la somme s'étend sur toutes les paires de premiers voisins $\langle i, j \rangle$ d'un réseau cubique de dimension L^3 avec des conditions de bords périodiques. Les couplages J_{ij} sont distribués selon une loi de probabilité :

$$\mathcal{P}(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij}). \quad (35)$$

Le paramètre de dilution p est la concentration de liaisons magnétiques dans le système ce qui signifie que $p = 1$ correspond au système pur. En-dessous du seuil de percolation [130] $p_c = 0,2488126(5)$, on ne s'attend pas à observer de transition de phase à température finie puisqu'en l'absence d'amas de spins percolants, l'ordre à grande distance ne peut se développer. Le modèle a été étudié au moyen de simulations Monte Carlo à grande échelle en utilisant l'algorithme d'amas de Swendsen-Wang [26] dans le régime des transitions du second ordre et l'algorithme multi-liaisons [29-32] dans le régime où la transition du premier ordre du modèle pur de Potts à 4 états persiste.

4.2 Le modèle d'Ising

La classe d'universalité du modèle d'Ising à 3 dimensions est caractérisée par les exposants critiques suivants, déterminés par simulation numérique [131] :

$$\nu = 0,6304(13), \quad \eta = 0,0335(25), \quad (36)$$

$$\beta/\nu = 0,517(3), \quad \gamma/\nu = 2 - \eta = 1,966(3), \quad (37)$$

$$\alpha = 0,1103(1). \quad (38)$$

L'exposant critique α étant positif, on s'attend à une influence importante du désordre sur les propriétés critiques (désordre pertinent). De nombreuses études antérieures avec un désordre de site ont été menées en simulation Monte Carlo [132-146] ou avec des approches du groupe de renormalisation [147-155]. Le modèle dilué peut être traité dans le régime faiblement dilué (concentration de liens magnétiques p proche de 1) par des méthodes analytiques perturbatives dans le cadre du groupe de renormalisation [156-160] où un nouveau point fixe indépendant de la dilution a été mis en évidence, mais pour des désordres plus importants seules les simulations Monte Carlo demeurent valides.

Parmi ces différentes études, des résultats contradictoires conduisent tantôt à l'obtention d'exposants critiques variables en fonction de la concentration en impuretés, tantôt à des exposants critiques constants caractérisant un nouveau point fixe désordonné. Finalement, les résultats auxquels on se référera principalement sont ceux de Ballesteros *et al.* [143] qui concernent l'étude du désordre de site par simulation Monte Carlo :

$$\beta/\nu = 0,519(3), \quad \gamma/\nu = 1,963(5), \quad \nu = 0,6837(53). \quad (39)$$

Leur valeur était néanmoins soumise à discussion en raison de la difficulté de déterminer numériquement les exposants critiques asymptotiques, en s'affranchissant des effets de taille et des phénomènes d'attraction des différents points fixes, particulièrement sensibles dans le cas des systèmes tridimensionnels.

Les techniques de calcul utilisées ici reposent sur les simulations Monte Carlo, réalisées de façon très intensive puisque, contrairement aux études antérieures menées à $2d$ et qui concernaient des distributions autoduales pour lesquelles le point critique était connu avec exactitude, la dualité n'est d'aucune aide à trois dimensions. Dans ce cas, le point de transition n'est donc pas accessible exactement et il doit tout d'abord être localisé avec le plus de précision possible par des balayages en température, et ceci pour diverses concentrations en impuretés. On peut noter cependant que l'étude des systèmes désordonnés est parfaitement adaptée, du point de vue numérique, à l'architecture parallèle des processeurs des calculateurs, puisque le calcul des grandeurs moyennes requiert la simulation d'un grand nombre de réalisations de désordre issues d'une même distribution de probabilité et qui peuvent être effectuées séparément sur plusieurs processeurs.

Nous avons déterminé dans un premier temps le diagramme de phase du modèle d'Ising désordonné, c'est-à-dire la température de transition séparant les phases ordonnée et désordonnée sur toute la gamme de dilution (concentration en impuretés comprise entre le seuil de percolation $p_c \sim 0,24$ et le système pur $p = 1$) à partir de la localisation du maximum de la susceptibilité magnétique (quantité divergente dans la limite thermodynamique) pour la plus grande taille avec les différentes concentrations [125].

Le principal problème rencontré dans les travaux antérieurs sur le modèle d'Ising désordonné concernait la question de la détermination d'exposants effectifs ou asymptotiques. Bien que le changement de classe d'universalité doive se produire théoriquement pour un désordre arbitrairement faible, il peut être extrêmement difficile en réalité de mesurer les nouveaux exposants critiques car le comportement asymptotique ne peut pas toujours être atteint en pratique. Une difficulté supplémentaire, extrêmement préjudiciable sur le plan numérique, provient de la proximité des rapports des exposants critiques γ/ν et β/ν pour les points fixes pur et désordonné qui rend leur discrimination très délicate. En effet, ces valeurs sont, pour le système pur [131] :

$$\gamma/\nu = 1,966(3), \quad \beta/\nu = 0,517(3), \quad \nu = 0,6304(13), \quad (40)$$

et pour le modèle d'Ising désordonné avec un désordre de site [143] :

$$\gamma/\nu = 1,963(5), \quad \beta/\nu = 0,519(3), \quad \nu = 0,6837(53). \quad (41)$$

Par effets de taille finie, le seul exposant critique accessible permettant de distinguer les deux points fixes est donc l'exposant ν associé à la divergence de la longueur de corrélation ($\xi \sim t^{-\nu}$) mais il faut remarquer que même pour cet exposant, l'écart relatif que nous cherchons à mettre en évidence par rapport à la valeur du modèle pur est inférieur à 10% si le point fixe désordonné avec un désordre de liaison est le même

que pour le désordre de site. Pour les autres exposants, il faudra avoir recours au comportement des différentes grandeurs physiques en fonction de la température, ce qui est numériquement beaucoup plus difficile à mettre en oeuvre. Indépendamment du calcul de la longueur de corrélation, l'exposant ν peut également être calculé à partir de la dérivée de l'aimantation par rapport à la température qui doit se comporter selon :

$$\frac{d \ln \bar{m}}{dK} \sim L^{1/\nu}. \quad (42)$$

Nous avons déterminé l'exposant effectif dépendant de la taille $(1/\nu)_{\text{eff}}$, tracé en fonction de $1/L_{\text{min}}$ où L_{min} est la taille minimum intervenant dans l'ajustement en loi de puissance pour différentes concentrations de liaisons p et des tailles allant jusqu'à $L = 20$ sur la figure 8(a).

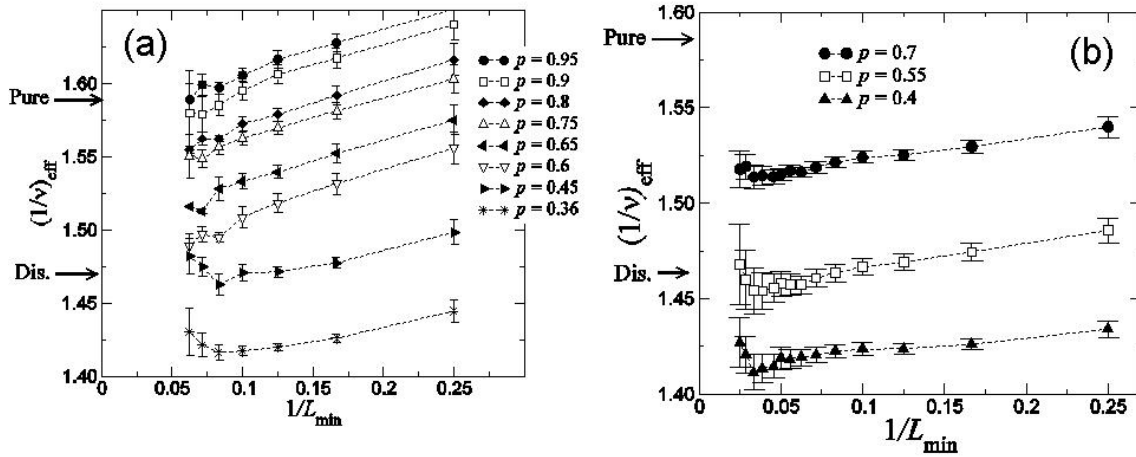


Figure 8. Exposants effectifs $(1/\nu)_{\text{eff}}$ obtenus à partir d'ajustements en loi de puissance en fonction de $1/L_{\text{min}}$. Les barres d'erreur correspondent aux déviations standards des ajustements. Les flèches indiquent les valeurs de $1/\nu$ pour le modèle pur [131] et le modèle dilué de site [143]. (a) Les concentrations étudiées sont $p = 0.95, 0.9, 0.8, 0.75, 0.65, 0.6, 0.45$ et 0.36 avec une taille maximum $L = 20$. (b) Les concentrations sont $p = 0.7, 0.55$ et 0.4 et la limite supérieure dans l'ajustement est $L = 96$.

On constate que dans le régime faiblement dilué (p proche de 1), le système est clairement influencé par le point fixe pur. A l'autre extrémité, lorsque la concentration de liaison est petite, la proximité du point fixe de percolation induit une décroissance de $1/\nu$ en-dessous de la valeur désordonnée attendue (~ 1.46). En effet, le point fixe de percolation est caractérisé par $1/\nu \sim 1.12$ [130] et pour des concentrations proches

du seuil de percolation ($p_c \sim 0,25$) il n'est pas surprenant que l'influence du point fixe de percolation se manifeste de façon aussi nette. Ce résultat est confirmé par l'étude de 3 concentrations spécifiques $p = 0,7, 0,55$ et $0,4$ avec des tailles allant jusqu'à $L = 96$ (figure 8(b)). La variation de $(1/\nu)_{\text{eff}}$ avec $1/L_{\text{min}}$ indique clairement un écart des données par rapport au comportement asymptotique $d \ln \bar{m}/dK \sim a_{d \ln m} L^{1/\nu}$ signifiant l'existence de corrections à ce comportement dominant ou l'effet d'un changement de comportement (*cross-over*) (voire les deux). D'un point de vue qualitatif, on observe que la concentration pour laquelle ces effets de corrections au comportement dominant sont les moins importants est $p = 0,55$.

L'aimantation moyenne $\bar{m}$ et la susceptibilité moyenne $\bar{\chi}$ sont supposées se comporter, à la température de transition, en fonction de la taille selon :

$$\bar{m}_{K_{\text{max}}} \sim a_m L^{-\beta/\nu}, \quad \bar{\chi}_{\text{max}} \sim a_\chi L^{\gamma/\nu}, \quad (43)$$

où a_m et a_χ sont des amplitudes non universelles (contrairement aux exposants critiques). En procédant comme précédemment, nous avons déterminé les exposants $(\beta/\nu)_{\text{eff}}$ et $(\gamma/\nu)_{\text{eff}}$ pour les 3 principales concentrations étudiées.

Pour ce qui concerne l'aimantation, nous avons observé que les rapports d'exposants critiques convergent, lorsque la taille augmente, vers 0,515(5) pour les 3 concentrations, en accord avec les valeurs attendues pour les modèles pur et avec un désordre de site. Pour la susceptibilité en revanche, le comportement de $(\gamma/\nu)_{\text{eff}}$ est plus différencié en fonction de la valeur de p : les cas $p = 0,7$ et $0,55$ sont compatibles avec 1,965(10) si l'on tient compte des barres d'erreur, ce qui est cohérent avec les valeurs du modèle pur et avec un désordre de site mais le cas $p = 0,4$ conduit à un exposant $(\gamma/\nu)_{\text{eff}}$ sensiblement plus grand. Cette différence est vraisemblablement due à l'influence du point fixe de percolation pour lequel le ratio γ/ν est proche de 2,05. Finalement, les exposants critiques déterminés à partir de l'étude par effets de taille finie sont résumés dans le tableau 1 pour les 3 concentrations étudiées et l'on observe un bon accord avec la relation d'hyperscaling $d = 2\beta/\nu + \gamma/\nu$.

Table 1. Exposants critiques du modèle d'Ising tridimensionnel désordonné avec un désordre de liaison déduits de l'étude par effets de taille finie.

p	0,7	0,55	0,4
$1/\nu$	1,52(2)	1,46(2)	1,42(2)
ν	0,660(10)	0,685(10)	0,705(10)
β/ν	0,515(5)	0,513(5)	0,510(5)
γ/ν	1,965(10)	1,977(10)	2,000(10)
$2\beta/\nu + \gamma/\nu$	2,995(20)	3,003(20)	3,020(20)

L'étude en température du comportement de l'aimantation et de la susceptibilité doit permettre de s'affranchir des obstacles rencontrés précédemment puisque les exposants critiques eux-mêmes (et non plus les rapports d'exposants) sont relativement distincts :

modèle d'Ising pur : $\beta = 0,3258(14)$, $\gamma = 1,2396(13)$ [131],

modèle désordonné (de site) : $\beta = 0,3546(28)$, $\gamma = 1,342(10)$ [143].

En fonction de la température réduite $t = (K_c - K)$ et de la taille du système L , l'aimantation et la susceptibilité sont supposées se comporter de la façon suivante :

$$\bar{m}(t, L) \sim |t|^\beta f_\pm(L^{1/\nu}|t|), \quad (44)$$

$$\bar{\chi}(t, L) \sim |t|^{-\gamma} g_\pm(L^{1/\nu}|t|), \quad (45)$$

où $f_\pm$ et $g_\pm$ sont des fonctions d'échelle de la variable $x = L^{1/\nu}|t|$ à haute ou basse température (par rapport à la température critique). On peut alors définir des exposants critiques effectifs dépendant de la température :

$$\beta_{\text{eff}}(|t|) = d \ln \bar{m} / d \ln |t|, \quad (46)$$

$$\gamma_{\text{eff}}(|t|) = -d \ln \bar{\chi} / d \ln |t|, \quad (47)$$

qui doivent converger vers les exposants critiques asymptotiques β et γ lorsque $L \rightarrow \infty$ et $|t| \rightarrow 0$. Le résultat concernant la susceptibilité magnétique avec $p = 0,7$ est représenté sur la figure 9.

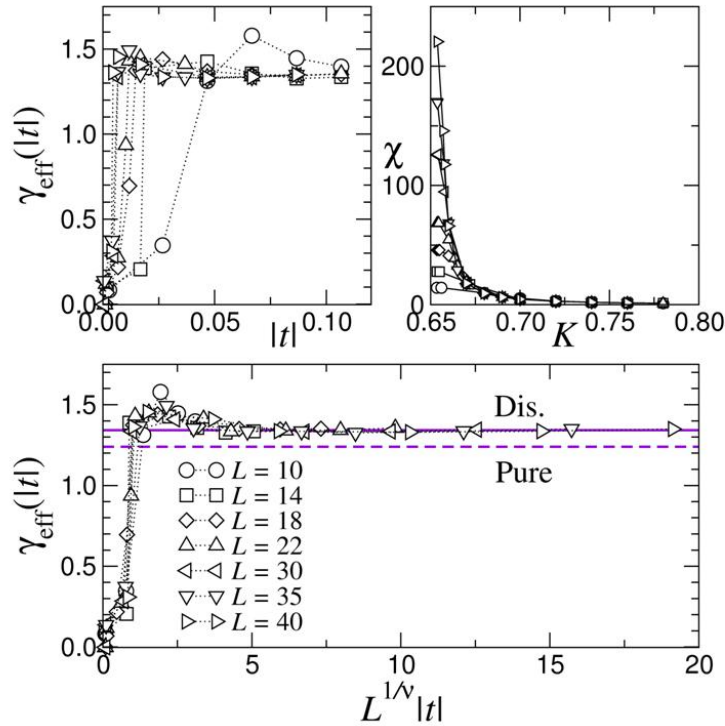


Figure 9. Variation de l'exposant critique effectif dépendant de la température $\gamma_{\text{eff}}(|t|)$ en fonction de la température réduite $|t|$ (en haut à gauche) et de $L^{1/\nu}|t|$ (en bas) pour la concentration $p = 0,7$ et plusieurs tailles du réseau L . Les lignes pointillées horizontales indiquent la position des exposants γ pour les modèles pur et désordonné (de site). La susceptibilité en fonction du couplage $K = J/k_B T$ dans la phase ordonnée est représentée sur la figure en haut à droite.

On constate que pour les plus grandes tailles, $\gamma_{\text{eff}}(|t|)$ est stable autour de 1,34 lorsque $|t|$ n'est pas trop petit, c'est-à-dire lorsque les effets de taille ne sont pas trop importants. La courbe de $\gamma_{\text{eff}}(|t|)$ en fonction de la variable renormalisée $L^{1/\nu}|t|$ montre que le comportement critique en loi de puissance est obtenu pour différentes gammes de températures pour les différentes tailles étudiées. Une détermination quantitative plus précise pour les concentrations $p = 0,55$ et $p = 0,7$ nous donne une estimation de $\gamma \approx 1,34 - 1,36$, ce qui est clairement différent de $\gamma \approx 1,24$ pour le modèle pur.

A partir de ces données en température, il est également possible de tracer les fonctions d'échelle $f_{\pm}(x)$ et $g_{\pm}(x)$ en suivant une procédure proposée par Binder et Landau qui consiste à écrire le développement de Taylor des fonctions d'échelle en puissance de l'inverse de la variable d'échelle $x^{-1} = (L^{1/\nu}|t|)^{-1}$ [161] :

$$\bar{\chi}_{\pm} L^{-\gamma/\nu} = \tilde{g}_{\pm}(x) = \Gamma_{\pm} x^{-\gamma} + O(x^{-\gamma-1}), \quad (48)$$

$$\bar{m}_{\pm} L^{\beta/\nu} = \tilde{f}_{\pm}(x) = x^{\beta} \begin{cases} (0 + B'_+ x^{-1} + O(x^{-2})), & K < K_c^{\infty}, \\ (B_- + B'_- x^{-1} + O(x^{-2})), & K > K_c^{\infty}, \end{cases} \quad (49)$$

où $\tilde{g}_{\pm}(x) = x^{-\gamma} g_{\pm}(x)$. Ces grandeurs sont représentées sur la figure 10 dans la phase désordonnée pour les 3 concentrations étudiées et différentes tailles. La même procédure dans la phase ordonnée ($K > K_c^{\infty}$) donne les pentes moyennes $\beta \simeq 0,355$ et $-\gamma \simeq -1,34$ [126].

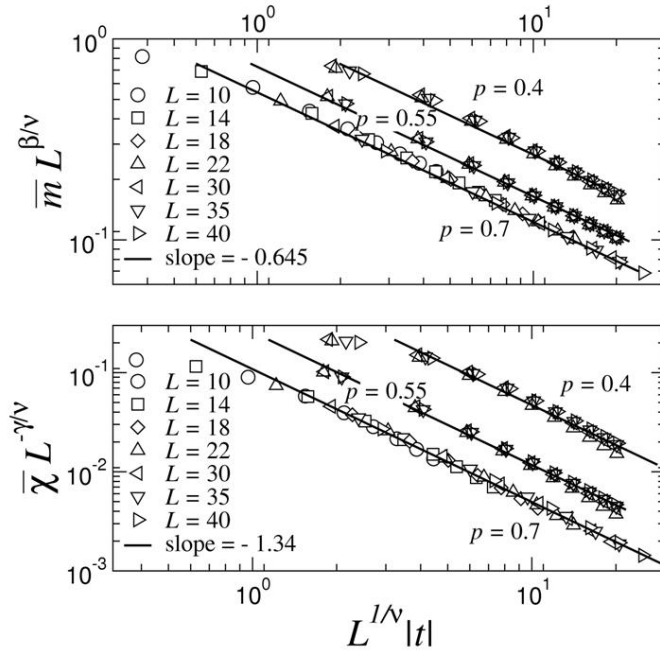


Figure 10. Tracé en échelle logarithmique des fonctions d'échelle $\bar{m}L^{\beta/\nu}$ (en haut) et $\bar{\chi}L^{-\gamma/\nu}$ (en bas) en fonction de $L^{1/\nu}|t|$ pour $p = 0,4, 0,55$ et $0,7$ dans la phase désordonnée ($K < K_c^{\infty}$). Les droites montrent les comportements en lois de puissance avec les exposants $\beta - 1 \simeq -0,645$ et $-\gamma \simeq -1,34$ qui caractérisent le point fixe désordonné.

On obtient de façon très nette des courbes maîtresses universelles dont les pentes, avec une échelle logarithmique, permettent de retrouver les exposants critiques $\beta \simeq 0,355$ et $\gamma \simeq 1,34$. Ces données permettent également de déterminer les amplitudes de la susceptibilité Γ_+ et Γ_- dont les rapports constituent des informations utiles qui n'avaient encore jamais été déterminées :

$$\Gamma_+/\Gamma_- = 1,62 \pm 0,10 \quad (p = 0,7), \quad (50)$$

$$\Gamma_+/\Gamma_- = 1,50 \pm 0,10 \quad (p = 0,55), \quad (51)$$

$$\Gamma_+/\Gamma_- = 1,48 \pm 0,20 \quad (p = 0,4). \quad (52)$$

Les valeurs ainsi obtenues sont compatibles pour les 3 concentrations si l'on tient compte des barres d'erreur mais il convient de noter qu'elles sont en contradiction avec leur détermination effectuée par Bervillier et Shpot [160] qui obtiennent $\Gamma_+/\Gamma_- = 3,05(32)$ dans le cadre d'une approche de théorie des champs. Ce désaccord n'invalide cependant pas notre démarche puisque l'amplitude de la susceptibilité dépend évidemment de la définition utilisée pour la calculer (il existe plusieurs définitions différentes). Dans tous les cas, notre estimation pour le modèle d'Ising désordonné diffère clairement de celle du modèle pur pour lequel les valeurs de Γ_+/Γ_- varient de 4,70 à 4,95 avec des méthodes de développement en série à haute température ou par des méthodes Monte Carlo [162].

En résumé, il est possible de synthétiser la variation des exposants effectifs incluant les corrections d'échelle ou les phénomènes de *cross-over* entre les différents points fixes à partir d'une figure qui s'inspire des études théoriques dans le cadre du groupe de renormalisation (figure 11) [163].

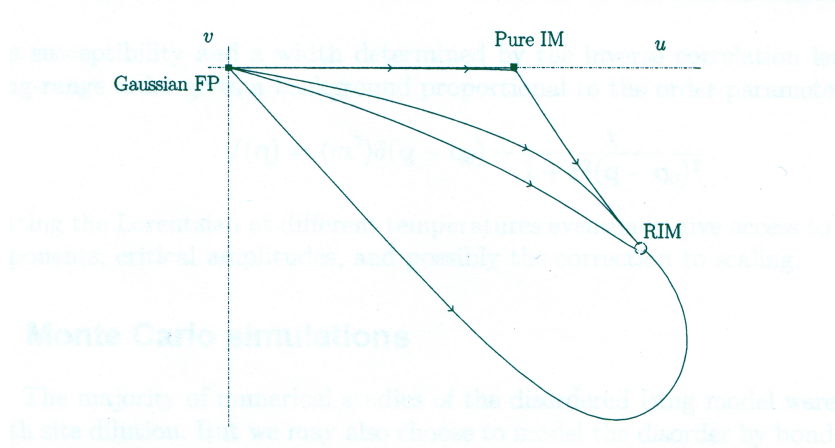


Figure 11. Flots du groupe de renormalisation dans l'espace des paramètres (u, v) . Les points notés "Gaussian FP", "Pure IM" et "RIM" sont respectivement le point fixe gaussien, le point fixe du modèle d'Ising pur et le point fixe du modèle d'Ising désordonné.

Dans le cas de systèmes ferromagnétiques décrits par le modèle de Heisenberg tridimensionnel pour lequel l'exposant critique α est négatif, l'observation expérimentale

d'un maximum de l'exposant γ_{eff} trouve une explication théorique en terme de trajectoires dans l'espace des paramètres [164]. La même observation s'applique au cas du modèle d'Ising désordonné mais les exposants critiques changent également au point fixe désordonné dans ce dernier cas.

Il convient enfin de noter que l'étude du modèle d'Ising désordonné à 3 dimensions donne toujours lieu à des controverses, en particulier dans le cas d'un désordre corrélé à longue distance (lignes d'impuretés avec ou sans intersection). Ce type de désordre s'apparente au modèle de McCoy-Wu à 2 dimensions [165,166]. Les résultats analytiques et numériques conduisent à des valeurs des exposants critiques d'une part de l'ordre de $\nu \approx 1$, $\gamma \approx 1,97$, $\beta \approx 0,52$ [167,168], d'autre part de l'ordre de $\nu \approx 0,71$, $\gamma \approx 1,44$, $\beta \approx 0,36$ [169-172] en passant par $\nu \approx 0,86$, $\gamma \approx 1,50$, $\beta \approx 0,52$ [173] sans que des erreurs manifestes puissent être relevées dans la conduite de ces différentes études. Du point de vue théorique, l'étude des systèmes modèles désordonnés n'a donc pas encore abouti à une compréhension totale des phénomènes mis en jeu.

4.3 Le modèle de Potts

A 3 dimensions, le modèle de Potts à 4 états présente une transition de phase du premier ordre fortement marquée - plus précisément, la transition est du premier ordre dès que $q \geq 3$. Le choix $q = 4$ est fondé sur l'exigence d'une transition fortement du premier ordre dans le système non perturbé afin de rendre sensible l'effet du désordre. On s'attend à ce que la transition reste du premier ordre dans le régime des faibles concentrations en impuretés, puis qu'un régime du second ordre apparaisse à partir d'une concentration seuil, jusqu'au seuil de percolation au-delà duquel il ne peut plus exister de phase ordonnée à température finie.

Dans le cadre de cette étude, nous avons réalisé des simulations numériques pour des tailles du réseau tridimensionnel modérément grandes dans le régime du premier ordre mais nous avons plutôt concentré notre effort sur le régime du second ordre avec, dans ce cas, des simulations à grande échelle.

Du point de vue numérique, le choix des algorithmes ainsi que les paramètres de simulation auxquels nous avons recours sont tout-à-fait différents selon que l'on étudie une transition du second ordre ou une transition du premier ordre. En effet, au voisinage de la température de transition, des phases métastables sont susceptibles de coexister dans le cas d'une transition du premier ordre ce qui conduit au phénomène de "*super-ralentissement critique*" (par rapport au *ralentissement critique* standard lié à la divergence de la longueur de corrélation dans le cas des transitions du second ordre) ce qui nécessite, du point de vue numérique, un accroissement considérable du nombre de pas Monte Carlo à utiliser afin de décrire correctement l'état d'équilibre du système. C'est la raison pour laquelle nous avons d'abord voulu identifier qualitativement les deux régimes (1^{er} ordre et 2nd ordre) pour différentes tailles du système. Pour ce faire, nous avons représenté sur la figure 12 la variation de la susceptibilité en fonction du couplage

βJ pour 2 concentrations très différentes : $p = 1,00$ pour laquelle la transition est sans aucun doute du 1^{er} ordre et $p = 0,48$ où on s'attend à ce qu'elle soit du 2nd ordre.

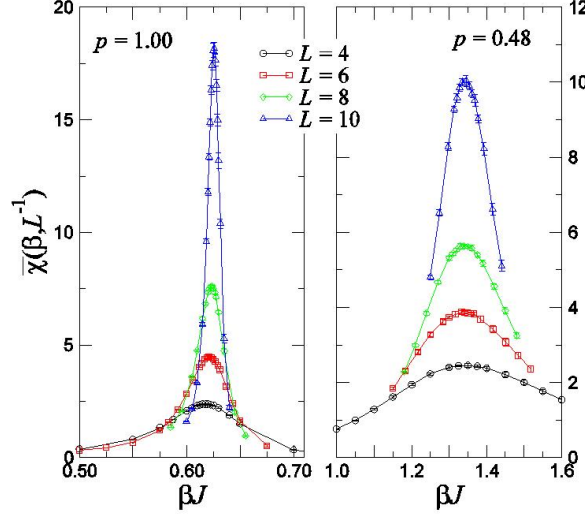


Figure 12. Evolution de la susceptibilité lorsque la taille du système augmente (jusqu'à $L = 10$) dans les deux différents régimes : système pur $p = 1,00$ sur la figure de gauche, et système fortement dilué $p = 0,48$ sur la figure de droite.

On constate effectivement que le pic de la susceptibilité devient de plus en plus aigü lorsque la taille augmente pour $p = 1,00$, ce qui correspond bien à une transition du 1^{er} ordre [174], tandis que, lorsque $p = 0,48$, les pics sont adoucis et sont compatibles, à première vue, avec une transition du second ordre. Dans le régime du 2nd ordre (ou faiblement du 1^{er} ordre), nous avons choisi d'utiliser l'algorithme d'amas de Swendsen-Wang [26] afin de diminuer l'influence du ralentissement critique. Dans le régime du 1^{er} ordre fortement marqué (p proche de 1), nous avons choisi d'utiliser l'algorithme multi-liaisons [29], une version multicanonique de l'algorithme de Swendsen-Wang, afin d'augmenter l'occurrence des passages par effet tunnel entre les phases en présence à la température de transition. A titre d'exemple, nous avons utilisé les paramètres de simulation suivants, déterminés afin de toujours respecter la condition que le nombre de pas Monte Carlo soit supérieur ou égal à $10^4 \tau^e$:

200000 pas Monte Carlo pour $p = 0,76$ et $L = 16$ (régime du 1^{er} ordre),

tandis que dans le régime du second ordre :

100000 pas Monte Carlo pour $p = 0,68$ et $L = 50$,

30000 pas Monte Carlo pour $p = 0,56$ et $L = 96$,

15000 pas Monte Carlo pour $p = 0,44$ et $L = 128$.

Ces données justifient le fait que nous ayons dû limiter la taille du réseau dans le régime du 1^{er} ordre.

La figure 13 présente des exemples de simulations en fonction du nombre de pas Monte Carlo ("*time series*") pour des réalisations de désordre particulières pour les 3

plus grandes tailles étudiées avec les concentrations $p = 0,44$, $0,56$ et $0,68$ dans le régime du second ordre.

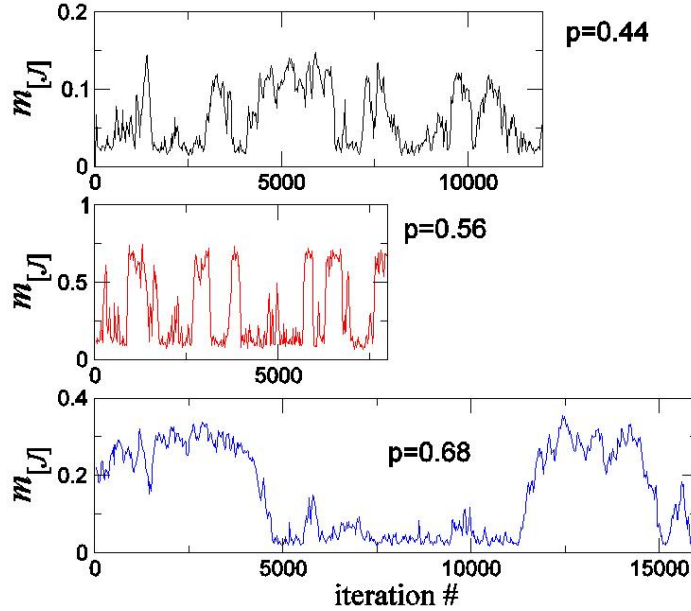


Figure 13. Données Monte Carlo de l'aimantation pour une réalisation de désordre particulière pour $p = 0,44$ et une taille de réseau $L = 128$, $p = 0,56$ ($L = 96$) et $p = 0,68$ ($L = 50$).

Dans chaque cas, la température de simulation est très proche de la température de transition et les passages par effet tunnel entre les phases ordonnées et désordonnées garantissent une moyenne thermique de bonne qualité. Comme pour le modèle d'Ising [126], les différentes réalisations de désordre conduisent à des valeurs de la susceptibilité, notées $\chi_{[J]}(\beta)$, très différentes à l'équilibre. Nous avons donc veillé à réaliser nos moyennes sur les configurations de désordre avec un nombre suffisamment grand de réalisations différentes (typiquement de 2000 à 5000) afin d'obtenir des estimations raisonnables des grandeurs non automoyennantes [79,175]. Si les moyennes sont effectuées sur un nombre trop petit de configurations aléatoires, on obtient des grandeurs typiques (c'est-à-dire les plus probables) et non les valeurs moyennes. En effet, comme on peut le voir sur la figure 14, la distribution de probabilité de $\chi_{[J]}$ (calculée à la température inverse $\beta_{\max}$ pour laquelle la susceptibilité moyenne est maximale) présente une longue queue de distribution correspondant aux événements rares avec des valeurs importantes de la susceptibilité [124].

On met en évidence l'importance de ces configurations en localisant sur la figure 14 la susceptibilité moyenne ($\chi_{[J]}/\bar{\chi} = 1$), la valeur médiane définie comme la valeur de $\chi_{[J]}$ pour laquelle la probabilité intégrée prend la valeur 50%, et enfin la moyenne sur les configurations avec une susceptibilité plus petite que la valeur médiane. Plus la valeur

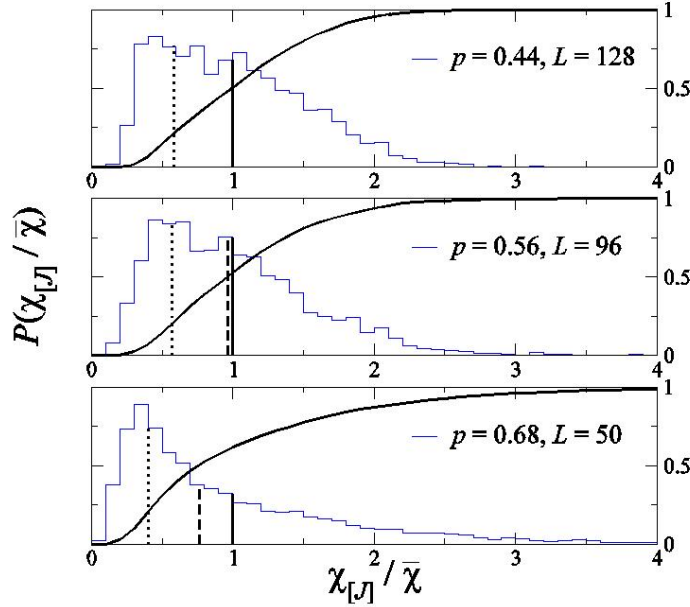


Figure 14. Distribution de probabilité de la susceptibilité $\chi_{[J]}(\beta_{\max})$ pour les concentrations de liaison $p = 0,44, 0,56$ et $0,68$ pour la plus grande taille du réseau dans chaque cas. Les courbes en gras représentent les distributions intégrées. Pour chaque dilution, la ligne verticale continue indique la localisation de la susceptibilité moyenne ($\chi_{[J]}/\bar{\chi} = 1$), la ligne en tirets indique la valeur médiane (valeur de $\chi_{[J]}$ pour laquelle la probabilité intégrée vaut 0,5) et la ligne pointillée montre la moyenne sur les événements plus petits que la valeur médiane.

médiane diffère de la valeur moyenne ($p = 0,68$ en particulier), plus la distribution de probabilité est asymétrique. On constate par ailleurs que le maximum de la distribution de probabilité (ce que l'on appelle les configurations typiques) correspond aux petites valeurs de la susceptibilité. Pour un nombre donné de configurations de désordre, ce pic est mieux décrit que la longue queue de distribution correspondant aux valeurs les plus importantes de la susceptibilité qui ont pourtant une forte contribution à la moyenne, ce qui décale celle-ci de la valeur la plus probable. Cela indique donc que l'étude du régime proche de celui correspondant à une transition du premier ordre ($p = 0,68$) nécessite des nombres de configurations très importants afin d'explorer correctement l'espace des configurations.

Nous avons déterminé le diagramme de phase du modèle ainsi que l'ordre de la transition en fonction de la concentration afin de localiser, avec le plus de précision possible, la séparation entre les régimes du 1^{er} et du 2nd ordre. Pour ce faire, nous avons déterminé le temps d'autocorrélation de l'énergie τ^e tracé avec une échelle logarithmique en fonction de la taille du système sur la figure 15 pour toutes les concentrations étudiées.

Dans le cas d'une transition du second ordre, comme on l'a déjà vu précédemment, τ^e est supposé se comporter selon $\tau^e(L) \sim L^z$ où z est l'exposant critique dynamique.

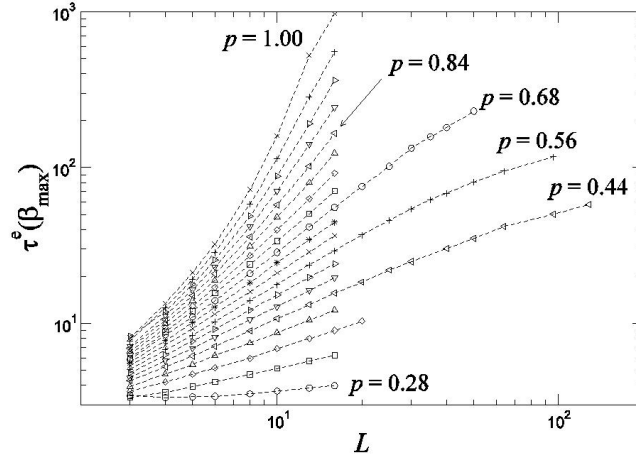


Figure 15. Temps d'autocorrélation de l'énergie τ^e en fonction de la taille du système à la (pseudo-)température de transition avec une échelle logarithmique. Les courbes correspondent aux différentes concentrations de liaison p (de $p = 0,28$ en bas à $p = 1,00$ en haut avec un pas de $0,04$). Ces résultats ont tous été obtenus à partir de simulations Monte Carlo avec l'algorithme de Swendsen-Wang.

Pour une transition du premier ordre, en revanche, la coexistence des phases ordonnée et désordonnée à la température de transition donne lieu à l'existence d'interfaces entre ces phases dont le coût énergétique se comporte selon $\beta\Delta F = 2\sigma_{\text{o.d.}}L^{d-1}$ où $\sigma_{\text{o.d.}}$ est la tension d'interface réduite. Par conséquent, le temps d'autocorrélation croît exponentiellement selon :

$$\tau^e(L) \sim e^{2\sigma_{\text{o.d.}}L^{d-1}}. \quad (53)$$

On constate sur la figure 15 une croissance du temps d'autocorrélation avec la taille du système qui semble cohérente avec une loi de puissance lorsque p n'est pas trop grand et une croissance vraisemblablement exponentielle si p est proche de 1. La distinction précise entre ces deux régimes n'est évidemment pas aisée sur cette figure mais on peut néanmoins localiser approximativement la frontière entre les 2 régimes autour de $p = 0,68$ (légèrement au-dessus). Un autre moyen pour déterminer l'ordre de la transition consiste à calculer la tension d'interface ordre-désordre $\sigma_{\text{o.d.}}$. Numériquement, elle peut être estimée à partir de la distribution de probabilité de l'énergie $P(e)$:

$$\frac{P_{\min}}{P_{\max}} \sim e^{-\beta\Delta F} = e^{-2\sigma_{\text{o.d.}}L^{d-1}}. \quad (54)$$

En effet, la barrière d'énergie libre peut être reliée au rapport des probabilités (de même poids) des phases ordonnée et désordonnée (correspondant aux 2 pics) et à la phase mélangée impliquant les 2 interfaces, qui correspond à la vallée entre les 2 pics. Pour ce calcul, nous partons de la température de transition effective estimée à partir du maximum de la susceptibilité magnétique. A cette température, les poids statistiques des phases ordonnée et désordonnée sont comparables, donc la hauteur des

pics est très différente. Afin de calculer la tension d'interface, on pondère les données Monte Carlo à la température à laquelle les 2 pics ont la même hauteur. Nous avons ainsi tracé la tension d'interface ordre-désordre en fonction de l'inverse de la taille du système à la température de transition sur la figure 16 (partie supérieure). On observe incontestablement une annulation de la tension d'interface pour $p = 0,56$, signe d'une transition du second ordre induite par le désordre.

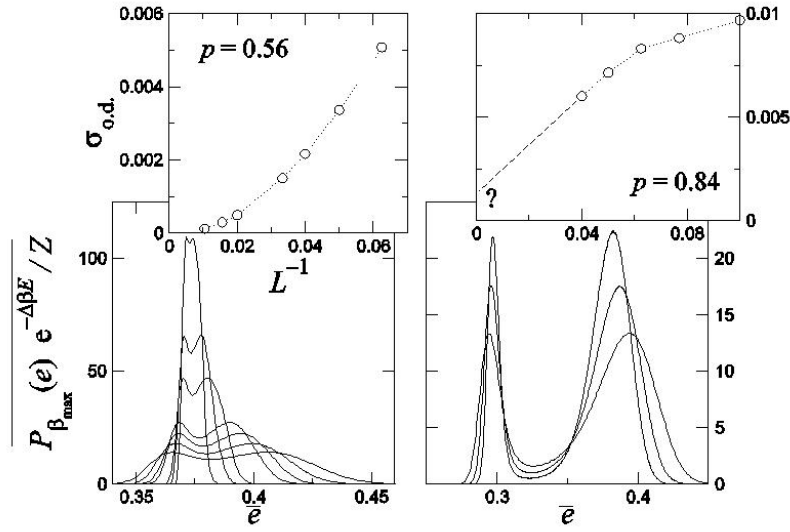


Figure 16. Distribution de probabilité de l'énergie à la température pour laquelle les deux pics ont la même hauteur. Les figures correspondent à 2 concentrations de liaisons différentes : $p = 0,56$ à gauche (algorithme de Swendsen-Wang, tailles croissantes $L = 25, 30, 35, 40, 50, 64$ et 96) et $p = 0,84$ à droite (simulations multi-canoniques, tailles $L = 16, 20$ et 25). La tension d'interface ordre-désordre $\sigma_{o.d.} = \ln(P_{\max}/P_{\min})/(2L^{d-1})$ est tracée en fonction de L^{-1} dans la partie supérieure de la figure.

En revanche, pour $p = 0,84$, la tension d'interface semble converger vers une valeur finie (mais très petite) dans la limite thermodynamique, ce qui serait en faveur de la persistance de la nature du premier ordre de la transition de phase depuis $p = 1$ jusqu'à cette concentration au moins. Par conséquent, nous en concluons que le point tricritique, séparant les régimes de transition du premier ordre de celui du second ordre, est vraisemblablement localisé entre $p = 0,68$ et $p = 0,84$. Cependant, il convient de noter que nous n'avons pu prouver sans ambiguïté par des simulations numériques sur des systèmes de taille finie que ce que nous avons identifié comme une transition de phase du 2nd ordre n'est pas une transition faiblement du 1^{er} ordre avec une longueur de corrélation plus grande que $L = 128$ ou que la croissance rapide du

temps d'autocorrélation pour $p \geq 0,84$ n'est pas un effet de *cross-over* vers un régime en loi de puissance pour de plus grandes tailles du système [124].

On s'intéresse maintenant plus particulièrement au régime du second ordre (c'est-à-dire pour $p \leq 0,68$), régime pour lequel nous avons réalisé une étude de la classe d'universalité au point fixe désordonné. Comme dans le cas du modèle d'Ising, nous calculons les exposants critiques en utilisant le comportement par effets de taille finie des grandeurs physiques à la température de transition effective inverse $\beta_c(L, p)$. De même que précédemment, on s'attend à ce que le flot de renormalisation soit soumis à l'influence de 3 points fixes décrivant respectivement le système pur, le système désordonné et la transition de percolation. Les comportements en lois de puissance sont donc susceptibles de présenter d'importantes corrections résultant d'un effet de *cross-over* vers un comportement universel unique pour les plus grandes tailles du réseau. Nous avons représenté sur la figure 17 le comportement par effets de taille finie du maximum de la susceptibilité $\bar{\chi}_{\max}$, de l'aimantation à $\beta_{\max}$ et de la dérivée de $\ln \bar{m}$ par rapport à l'inverse de la température évaluée à $\beta_{\max}$ en fonction de la taille du système avec une échelle logarithmique. Ces courbes doivent permettre d'accéder aux rapports entre les exposants γ/ν , β/ν et $1/\nu$ respectivement. Les 3 principales concentrations sont représentées.

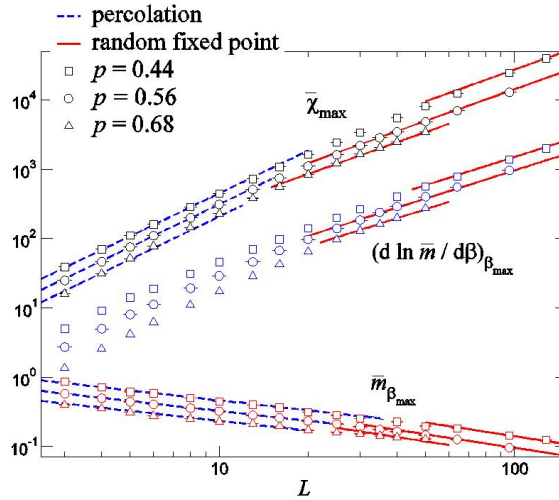


Figure 17. Comportement par effets de taille finie de la susceptibilité, de l'aimantation et de $\beta L^{-d} d \ln \bar{m} / d\beta$ à $\beta_{\max}$ (les grandeurs ont été décalées dans la direction verticale par souci de clarté). Le comportement aux petites tailles du réseau est probablement gouverné par le point fixe de percolation (indiqué par les lignes en tirets et caractérisé par les rapports d'exposants $\gamma/\nu \simeq 2,05$ et $\beta/\nu \simeq 0,475$). Au-dessus d'une taille de *cross-over* caractéristique, un nouveau point fixe désordonné est atteint (indiqué par les lignes continues avec les rapports d'exposants $\gamma/\nu \simeq 1,535$, $1/\nu \simeq 1,34$ et $\beta/\nu \simeq 0,73$).

On observe clairement un phénomène de *cross-over* entre deux régimes : pour les petites tailles du réseau, le système est fortement influencé par la proximité d'un point

fixe perturbé tandis qu'un point fixe différent mais unique est apparemment atteint pour les plus grandes tailles avec une pente a priori indépendante de la concentration atteinte lorsque $L \geq 30$ [121,124]. Finalement, nos résultats concernant les exposants critiques sont résumés ci-dessous.

- Pour des petites tailles, le comportement de $\overline{\chi}_{\max}$ et $\overline{m}_{\beta_{\max}}$ est compatible, pour les 3 concentrations, avec les exposants de la percolation $(\gamma/\nu)_{\text{perco}} \approx 2,05$ et $(\beta/\nu)_{\text{perco}} \approx 0,475$ (lignes en tirets sur la figure 17). Ce comportement est observé sur une gamme de tailles plus importante pour $p = 0,44$ que pour $p = 0,56$ ou $0,68$, dans le cas de la susceptibilité en particulier. Ce constat s'explique par une plus grande influence du point fixe de percolation lorsque $p = 0,44$ qui est plus proche du seuil de percolation que les 2 autres concentrations.
- Pour les grandes tailles, pour chaque grandeur considérée ici, les courbes correspondant aux 3 concentrations évoluent, après un régime de *cross-over* dont la localisation exacte dépend de la valeur de p , vers un comportement en loi de puissance vraisemblablement unique qui semble rester stable (droites en trait continu sur la figure 17). Nous estimons donc que nous avons atteint des tailles suffisamment grandes pour être en mesure de déterminer, avec une certaine incertitude, les exposants critiques du point fixe désordonné.

Les exposants critiques effectifs sont représentés sur la figure 18 en fonction de l'inverse de la taille du système intervenant dans les ajustements en loi de puissance. A nouveau, le *cross-over* entre les comportements gouvernés par les points fixes de percolation et désordonné est clairement visible au travers de la variation des exposants effectifs.

Une détermination précise des exposants critiques asymptotiques est donc assez délicate puisque, comme on peut le voir sur la figure 18, les exposants critiques effectifs $(\gamma/\nu)_{\text{eff}}$ et $(\beta/\nu)_{\text{eff}}$ ne convergent pas vers des limites indépendantes de p lorsque $L_{\min} \rightarrow L_{\max}$. Néanmoins, nous pouvons donner les estimations suivantes :

$$p = 0,44 : (\gamma/\nu)_{\text{eff}} \simeq 1,68(2), \quad 1/\nu_{\text{eff}} \simeq 1,36(2),$$

$$p = 0,56 : (\gamma/\nu)_{\text{eff}} \simeq 1,51(3), \quad 1/\nu_{\text{eff}} \simeq 1,33(3),$$

$$p = 0,68 : (\gamma/\nu)_{\text{eff}} \simeq 1,46(8), \quad 1/\nu_{\text{eff}} \simeq 1,38(8).$$

Finalement, tenant compte des effets de compétition entre les différents points fixes, plus ou moins importants selon les concentrations étudiées, nous en déduisons les valeurs suivantes pour les exposants critiques du modèle de Potts à 4 états désordonné, en nous appuyant plus particulièrement sur les données relatives à la concentration $p = 0,56$:

$$\gamma/\nu = 1,535(30), \quad \beta/\nu = 0,732(24), \quad 1/\nu = 1,339(25), \quad (55)$$

$$\gamma = 1,146(44), \quad \beta = 0,547(28), \quad \nu = 0,747(14). \quad (56)$$

On peut noter que ces exposants sont en assez bon accord avec les expressions obtenues pour le même modèle de "graphes en étoiles" à haute température [127-129] qui donnent $\gamma \simeq 1,00(3)$. Enfin, la valeur de ν est cohérente avec la valeur limite $\nu \geq 2/d = 0,6667$ associée à la stabilité du point fixe désordonné.

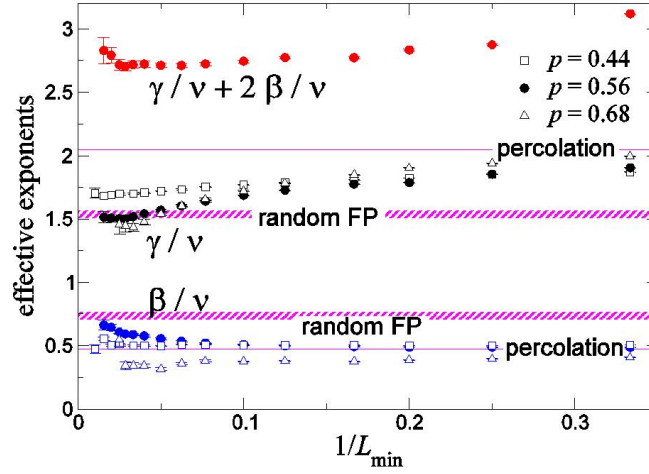
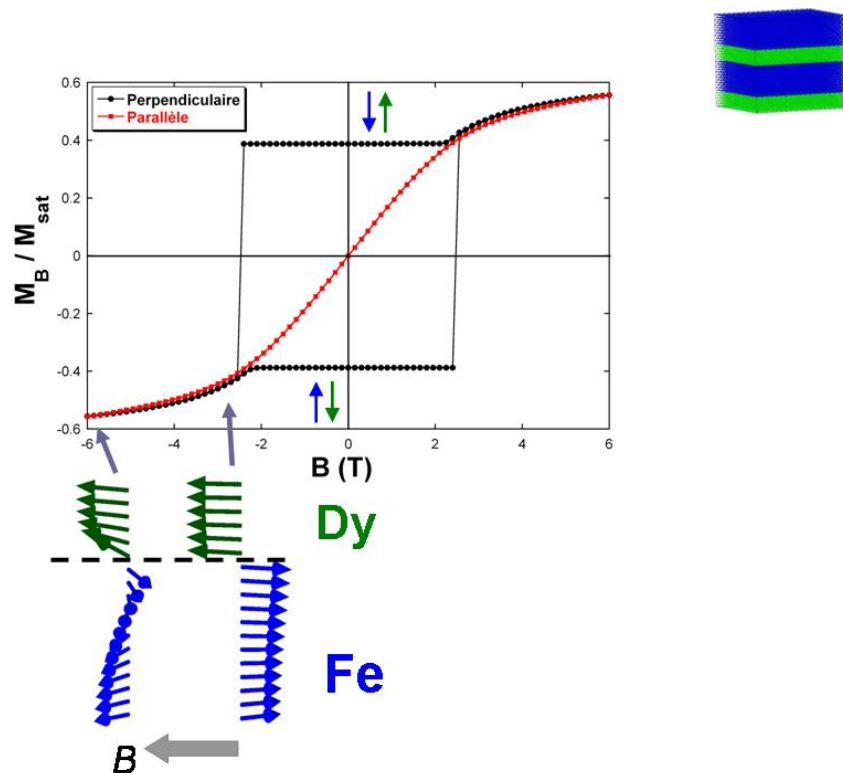


Figure 18. Exposants critiques effectifs γ/ν et β/ν calculés à partir d’ajustements en loi de puissance entre $L_{\min}$ et $L_{\max}$, avec $L_{\max}$ fixé à la valeur maximale accessible $L=128, 96$ et 50 pour $p=0,44, 0,56$ et $0,68$ respectivement. Ils sont tracés en fonction de $L_{\min}^{-1}$. Les lignes en trait continu fin indiquent les valeurs correspondant au point fixe de percolation et les bandes larges correspondent à notre estimation pour les valeurs du point fixe désordonné. Dans le cas de la dilution $p=0,56$, la valeur de $\gamma/\nu + 2\beta/\nu$ est également indiquée.

5. Conclusion

Dans le cadre de nos activités de recherche sur les systèmes modèles désordonnés, à 2 ou 3 dimensions, nous avons été amenés à utiliser des techniques de simulation numérique de plus en plus lourdes, faisant appel à des ressources informatiques sans cesse plus importantes. Ainsi, l’étude des systèmes tridimensionnels a imposé le recours à une collaboration entre équipes (Rouen, Nancy, Leipzig) afin de mettre à profit les compétences et les ressources informatiques des différentes équipes. Incontestablement, ce projet n’aurait pu être mené à son terme par une équipe seule en raison de l’ampleur du temps de calcul nécessaire. Ces travaux auront permis de faire avancer l’état de nos connaissances sur les systèmes désordonnés, confirmant un certain nombre de prévisions théoriques sur la nature du diagramme de phase et des transitions induites par le désordre mais elle aura également permis de mettre l’accent sur l’influence majeure des événements rares sur la statistique des grandeurs moyennes. En particulier, nous avons mis en évidence le fait que des simulations numériques menées de façon insuffisamment rigoureuses peuvent conduire à une erreur d’analyse sur la nature de la transition de phase en raison des effets de *cross-over* entre points fixes qui peuvent s’avérer particulièrement importants.

Chapitre 3. Étude de systèmes magnétiques



1. Introduction

Dans la continuité de nos travaux sur les systèmes modèles désordonnés, nous nous sommes ensuite intéressés à l'étude des propriétés magnétiques dans des systèmes réels nanostructurés. De façon générale, ces études s'inscrivent dans le cadre du nanomagnétisme qui consiste à concentrer son attention sur les processus magnétiques fondamentaux à l'échelle du nm [176]. Depuis quelques décennies, les physiciens et chimistes des matériaux se sont aperçus que, dans le cadre de leur tentative continue de miniaturiser les dispositifs technologiques, il apparaît une dimension en-deça de laquelle la physique macroscopique cesse d'être valide. Cette dimension, qui dépend des propriétés auxquelles on s'intéresse, donne lieu au développement d'un nouveau champ de la physique, la physique mésoscopique. Lorsque l'on diminue encore la dimension caractéristique des matériaux étudiés, on constate que certaines propriétés physiques sont très fortement corrélées à l'échelle de longueur qui structure et organise les phénomènes physiques mis en jeu. Ainsi, par exemple, les objets magnétiques nanométriques sont organisés à l'échelle des longueurs fondamentales du magnétisme et du transport électronique, ce qui donne naissance à des phénomènes nouveaux très fortement dépendants de la taille comme la magnéto-résistance géante [177,178]. Ces effets reposent de façon cruciale sur le rôle joué par les surfaces et les interfaces entre matériaux. L'étude des propriétés magnétiques des matériaux fait intervenir, pour l'essentiel, les énergies suivantes : l'énergie Zeeman, l'énergie d'échange, l'énergie dipolaire (anisotropie de forme), l'énergie d'anisotropie magnétocristalline, l'énergie d'anisotropie magnétoélastique, l'énergie d'anisotropie de direction des liaisons, l'énergie de magnétostriction. La configuration de l'aimantation dans un élément magnétique est alors directement issue de la compétition entre ces différents termes. C'est l'interaction d'échange qui est habituellement la plus forte mais elle a une très courte portée ce qui justifie qu'on la modélise généralement sous forme d'un développement entre premiers voisins. La compétition entre l'énergie d'échange et les autres sources d'énergie va donc fixer les distances caractéristiques sur lesquelles l'aimantation peut changer d'orientation. Par exemple, la formation de domaines magnétiques est une conséquence directe de cette compétition entre énergie d'échange, énergie d'anisotropie magnétocristalline et énergie dipolaire [179]. De même, l'existence des parois de Bloch est le fruit de la compétition entre énergie d'échange et énergie d'anisotropie magnétocristalline. Leur dimension caractéristique dans le cas d'un milieu magnétique de dimension infinie est $\Delta_{PB} = 2\sqrt{A/K}$ qui varie entre 7 et 100nm pour les matériaux habituels. La compétition entre énergie d'échange et interaction dipolaire peut donner lieu à l'existence de vortex d'aimantation que l'on peut observer par exemple dans un disque de film mince de matériau magnétique doux (d'anisotropie magnétocristalline négligeable). Ces non-uniformités à l'échelle de la longueur d'échange $\Lambda_{ech} = \sqrt{2A/\mu_0 M_s^2}$ ont des conséquences considérables sur la façon dont l'aimantation d'une nanostructure se retourne sous l'effet d'un champ appliqué [180,181].

Sur le plan des simulations numériques, en particulier les simulations Monte

Carlo qui sont réalisées à l'échelle atomique, l'évolution vers l'échelle nanométrique de l'étude des matériaux combinée à l'accroissement continu des performances numériques des calculateurs autorise aujourd'hui une étude pratiquement *à l'échelle* de certaines propriétés physiques puisque les nombres d'atomes mis en jeu peuvent être de quelques milliers à quelques millions. C'est à partir de ce constat que nous avons entrepris progressivement l'étude de nanoparticules magnétiques et de multicouches magnétiques d'épaisseur nanométrique de structure amorphe ou polycristalline.

2. Propriétés de nanoparticules magnétiques

2.1 Introduction

Les nanoparticules magnétiques donnent lieu à certaines propriétés particulières telles que les structures en domaines [182] ou le superparamagnétisme [183]. Ces systèmes présentent également un intérêt évident sur le plan des applications puisque la rétention de l'information repose désormais sur la stabilité thermique de grains magnétiques comportant quelques dizaines de milliers d'atomes. Ainsi, des nanoparticules ferromagnétiques suffisamment petites sont monodomaines et peuvent être de bons candidats pour le stockage haute densité de l'information [176,184-187]. Par ailleurs, le stockage haute densité requiert également une connaissance précise des phénomènes liés à la dynamique du retournement de l'aimantation, à des échelles de temps caractéristiques de l'ordre de la nanoseconde. L'étude du retournement de l'aimantation de nanoparticules individuelles sous champ magnétique appliqué à très basse température est rendu possible expérimentalement depuis un peu plus de 10 ans grâce à la technique du micro-SQUID [188-191]. A partir de différentes techniques de mesure sur une particule de cobalt de forme ellipsoïdale, Wernsdorfer et ses collaborateurs ont montré que le renversement de l'aimantation pouvait être décrit par l'activation thermique au-dessus d'une barrière d'énergie unique conformément au modèle qu'avaient proposé Néel et Brown [192,193]. Sur le plan numérique, différentes études ont été réalisées à partir de simulations Monte Carlo basées sur le modèle d'Ising [194-196] ou de Heisenberg [197,198]. Dans le cas de systèmes fortement anisotropes, il a été montré que le processus de retournement n'est pas uniforme mais qu'il nécessite plutôt des mécanismes de nucléation. Dans notre cas, nous avons voulu reproduire le renversement de l'aimantation par rotation uniforme dans une nanoparticule ferromagnétique unique avec une anisotropie uniaxiale à très basse température. Comme les spins sont fortement couplés et que la barrière d'énergie est grande comparée à l'énergie thermique ce qui signifie que le temps de vie de l'état métastable est très grand, le formalisme de la dynamique de Langevin [193] nécessiterait un effort considérable sur le plan numérique. En effet, pour de tels systèmes, cette méthode est restreinte à des échelles de temps de quelques nanosecondes

[39]. Nous avons donc choisi d'utiliser des simulations Monte Carlo qui ne prennent pas en compte le processus de précession des spins mais permettent de décrire des échelles de temps bien plus importantes. Nous nous intéressons ici au champ de retournement qui dépend de la température mais aussi du taux de variation du champ magnétique appliqué. De façon plus précise, nous souhaitons vérifier le comportement d'échelle prévu par des calculs analytiques approchés [199,200] dans le cadre du modèle de Néel-Brown. Nos résultats sont comparés aux résultats expérimentaux de Wernsdorfer et ses collaborateurs [188,189] qui sont en bon accord avec ce comportement d'échelle.

2.2 Retournement de l'aimantation d'une nanoparticule unique

La configuration stable d'une particule ferromagnétique de rayon R dépend des 2 rapports R/λ et R/δ où $\lambda \sim \sqrt{J}/M_s$ est la longueur d'échange et $\delta \sim \sqrt{J/D}$ est la largeur de la paroi de domaine (J, M_s et D sont respectivement l'interaction d'échange, l'aimantation spontanée et la constante d'anisotropie uniaxiale par atome). Plus précisément, la particule est monodomaine (avec tous les spins alignés) si son rayon est plus petit qu'une valeur critique [186]. Une telle nanoparticule présente 2 états fondamentaux d'aimantation opposée le long de l'axe facile, par exemple l'axe x . Lorsqu'on applique un champ $\mathbf{H}$ dans la direction opposée à l'aimantation de la particule, on s'attend à ce que l'aimantation se retourne par rotation uniforme, c'est-à-dire que les spins demeurent parallèles au cours du retournement. D'après le modèle de Stoner-Wohlfarth [201] et sa généralisation [202,203], la barrière d'énergie qui est due seulement à l'anisotropie du système peut s'écrire à 0K :

$$\Delta E(H) = \Delta E_0 \left(1 - \frac{H}{H_{\text{sw}}^0} \right)^\alpha, \quad (57)$$

où ΔE_0 , la barrière d'énergie d'anisotropie en champ nul d'une particule de N spins, est donnée par $\Delta E_0 = NDS^2$ où S est la valeur du spin. L'exposant α dépend de la direction du champ appliqué : $\alpha = 2$ lorsque le champ est le long de l'axe d'anisotropie ou lui est perpendiculaire, $\alpha \approx 3/2$ sinon [188]. H_{sw}^0 , le champ pour lequel la barrière d'énergie s'annule, est le champ de retournement à 0K. Il est proportionnel au champ d'anisotropie H_a et dépend de la direction du champ appliqué. Lorsque le champ est appliqué selon l'axe d'anisotropie,

$$H_{\text{sw}}^0 = H_a = \frac{2DS}{g\mu_0\mu_B}, \quad (58)$$

où l'intensité du moment atomique est reliée à la valeur du spin $m = g\mu_B S$. Si $k_B T \ll \Delta E(H)$, seuls les états aimantés "up" et "down" selon l'axe des x peuvent être observés et si $k_B T \ll J$, les équations (57) et (58) demeurent approximativement valides. A partir de la théorie de Néel-Brown [192,193], le temps de vie de l'état métastable peut s'exprimer à partir d'une expression activée thermiquement

$$\tau(T, H) = \tau_0 \exp(\Delta E(H)/k_B T), \quad (59)$$

où le préfacteur τ_0 , par simplification, est habituellement supposé constant [188]. Finalement, c'est le transfert d'énergie thermique du réseau au système de spins

couplés qui est responsable de la rotation des moments magnétiques. τ_0 dépend donc de la température mais aussi du champ magnétique appliqué [192,193,204,205]. Le renversement de l'aimantation peut être étudié en augmentant le champ appliqué et en mesurant le champ de retournement. Comme la probabilité $P(t)$ que l'aimantation ne se soit pas retournée après un temps t décroît lorsque la température augmente ($P(t) = \exp[-t/\tau(T, H)]$), le champ de retournement diminue lorsque la température augmente. Par ailleurs, le champ de retournement augmente avec le taux de croissance du champ $v = dH/dt$. Le renversement de l'aimantation par activation thermique étant un phénomène stochastique, la trajectoire parcourue dans l'espace des phases est différente d'une expérience à une autre, si bien que le champ de retournement varie et l'on doit considérer une distribution de champs de retournement. Pour des taux de variation de champs suffisamment petits, cette distribution est donnée par [199] :

$$p(T, H) = \frac{1}{\tau(T, H)v} \exp \left[- \int_0^H \frac{dH'}{\tau(T, H')v'} \right]. \quad (60)$$

Elle correspond au produit de la probabilité $1/(\tau(T, H)v)$ que le retournement se produise dans l'intervalle $[H, H + dH]$ par la probabilité que le retournement ne se soit pas encore produit. A partir du développement en série de Taylor de $p(H)$ autour de son maximum, on peut déduire le champ de retournement moyen par :

$$H_{\text{sw}}(T, v) \approx H_{\text{sw}}^0 \left[1 - \left(\frac{k_B T}{\Delta E_0} \ln \left(\frac{cT}{v\varepsilon^{\alpha-1}} \right) \right)^{1/\alpha} \right], \quad (61)$$

où $c = k_B H_{\text{sw}}^0 / (\alpha \tau_0 \Delta E_0)$ et $\varepsilon = 1 - H_{\text{sw}} / H_{\text{sw}}^0$ [200,201]. En supposant que la déviation standard est approximativement égale à la demi-largeur de la distribution, on obtient

$$\sigma(T, v) \approx \frac{H_{\text{sw}}^0}{\alpha} \left(\frac{k_B T}{\Delta E_0} \right)^{1/\alpha} \left[\ln \left(\frac{cT}{v\varepsilon^{\alpha-1}} \right) \right]^{(1-\alpha)/\alpha}, \quad (62)$$

quantité qui augmente avec la température et le taux de variation du champ.

2.3 Modèle

Notre modèle consiste ici en un réseau cubique simple délimité par une sphère de rayon R avec des conditions de bords libres. Chaque site est occupé par un spin classique de Heisenberg $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ de module S afin de reproduire la rotation uniforme et d'étudier les effets de l'anisotropie. Le hamiltonien $\mathcal{H}$ est défini par :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - D \sum_i (S_i^x)^2 - \mathbf{H} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i, \quad (63)$$

où $J > 0$ est l'interaction d'échange ferromagnétique limitée aux premiers voisins et $D > 0$ est la constante d'anisotropie sur chaque site. Le dernier terme représente l'interaction avec le champ appliqué. Nous avons considéré ici un champ appliqué selon l'axe x : $\mathbf{H} = -H \mathbf{e}_x$. L'état fondamental correspond donc à tous les spins anti-parallèles au vecteur unitaire $\mathbf{e}_x$ tandis que l'état métastable correspond à tous les spins pointant dans la direction x . Il convient de préciser ici que nous avons considéré les mêmes

interactions d'échange, constantes d'anisotropie et axes d'anisotropie pour le coeur et la surface de la nanoparticule bien que l'anisotropie de surface soit habituellement considérée comme radiale et plus importante. Comme nos simulations concernent des nanoparticules de taille très petite, bien plus petite que la taille critique pour être monodomaine dans l'état rémanent [206], nous avons négligé les interactions dipolaires. La technique de simulation utilisée est la méthode Monte Carlo basée sur l'algorithme de Metropolis standard. La particule est initialement aimantée dans la direction x en appliquant un fort champ magnétique $\mathbf{H}_0 = H_0 \mathbf{e}_x$ ($H_0 > 0$) pendant n pas Monte Carlo. Ensuite, le champ appliqué antiparallèlement est incrémenté par pas successifs δH : $\mathbf{H}_p = -p\delta H \mathbf{e}_x$. Comme le champ est maintenu constant durant n pas Monte Carlo, le taux de variation du champ est défini par $v = \delta H/n$. La simulation est arrêtée lorsque le renversement de l'aimantation est observé (le critère choisi est $M_x < -0,8S$) et la valeur du champ de retournement est stockée. Pour chaque température et chaque valeur du taux de variation du champ, un nombre relativement grand de simulations n_s doit être réalisé afin d'obtenir une évaluation correcte du champ de retournement moyen $H_{sw}(T, v)$ (typiquement une centaine). Partant d'un état initial aimanté dans la direction x , une rotation uniforme de l'aimantation d'un angle θ génère une variation d'énergie :

$$\delta E = NS(1 - \cos \theta)[DS(1 + \cos \theta) - H], \quad (64)$$

dans laquelle il n'y a pas d'énergie d'échange. La simulation de ce mécanisme par l'utilisation d'un algorithme avec rotation d'un unique spin (RUS) implique l'augmentation de l'énergie d'échange pour chaque rotation individuelle de θ . Cette variation d'énergie correspondante du système est :

$$\delta E_{SSR} = S(1 - \cos \theta)[zJS + DS(1 + \cos \theta) - H], \quad (65)$$

où z est la coordonnée. Comme le fait d'autoriser la rotation d'un seul spin nécessite $\delta E_{RUS} \leq 0$ à 0K, aucune rotation individuelle ne peut se produire à 0K si $H < H_{SSR}^c = zJS + DS(1 + \cos \theta)$ et par conséquent, il n'y aura pas de rotation uniforme de tous les spins. Cela signifie clairement que l'algorithme est défaillant à 0K puisqu'il conduit à une valeur du champ de retournement plus grande que le champ qui permet le retournement d'un spin de surface ($z = 1$), c'est-à-dire $H = JS$ qui n'a rien à voir avec la valeur attendue H_{sw}^0 . A très basse température et pour un faible champ appliqué dans nos simulations ($\delta E_{RUS} > 0$), la rotation d'un spin unique a une très faible probabilité de se produire et la rotation uniforme elle-même peut nécessiter un très grand nombre de pas Monte Carlo. Cela signifie donc que le champ de retournement à très basse température sera surestimé sauf pour les valeurs suffisamment petites du taux de variation du champ.

2.4 Mesure du champ de retournement

Nous avons choisi les valeurs des paramètres physiques afin de pouvoir comparer nos résultats avec les résultats expérimentaux pour de petites tailles. Le processus

de renversement de l'aimantation dépend, comme les états stables, des rapports R/λ et R/δ . Dans leurs expériences, Wernsdorfer et ses collaborateurs ont étudié une nanoparticule de cobalt monodomaine de rayon $(12,5 \pm 2,5)\text{nm}$ [188] ce qui donne $R/\lambda \simeq 1,5$ et $R/\delta \simeq 0,3$. Nous avons considéré dans nos simulations $\delta H = 5.10^{-3}J$ et fait varier le nombre de pas Monte Carlo n pour obtenir différentes valeurs du taux de variation du champ appliqué v (n varie de 5.10^3 à 10^8 ; v/J varie de 10^{-6} à 5.10^{-11}). Nous avons vérifié que ces paramètres permettent de reproduire la rotation uniforme à très basse température ($k_B T/J = 0,01$ ou $0,1$) en constatant que le module de l'aimantation demeure pratiquement uniforme au cours du retournement [207,208], contrairement au cas où la constante d'anisotropie D est plus grande. La distribution de probabilité du champ de retournement pour 5000 échantillons est représentée sur la figure 19 à $k_B T/J = 0,01$ et $0,1$ pour 2 valeurs différentes du taux de variation du champ $v/J = 10^{-6}$ et 10^{-7} .

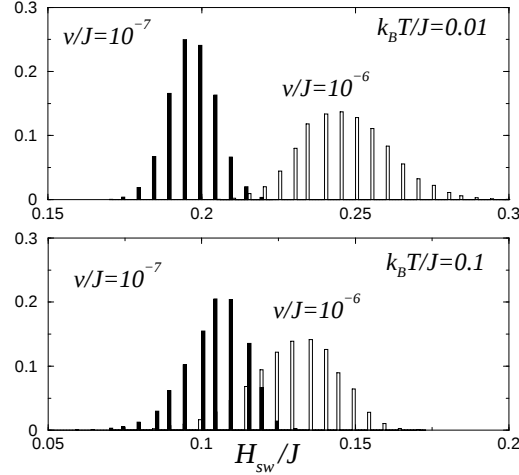


Figure 19. Distribution de probabilité du champ de retournement à $k_B T/J = 0,01$ et $0,1$ pour $v/J = 10^{-6}$ et 10^{-7} ($N = 33$ spins et $D = 0,1J$). Chaque histogramme est obtenu à partir de 5000 échantillons.

On constate que l'on obtient des distributions de forme gaussienne dont la largeur, proportionnelle à T , augmente avec v et T , en accord avec l'expression de $\sigma(T, v)$ (équation (62)). Ces résultats mettent en évidence une variation des champs de retournement avec le taux de variation du champ v/J pratiquement logarithmique comme cela a été observé expérimentalement [188] et des courbes différentes selon la température considérée. Afin de vérifier la validité de l'expression de $H_{sw}(T, v)$, on peut représenter les valeurs du champ de retournement moyen en fonction de $[k_B T \ln(cT/(v\epsilon))]^{1/2}$, où ϵ dépend de H_{sw} . Si le comportement d'échelle est satisfait, tous les points de mesure doivent se rassembler sur une seule courbe maîtresse en choisissant correctement les constantes H_{sw}^0 et c . Un ajustement auto-cohérent est alors obtenu lorsque l'ordonnée à l'origine correspond à la valeur choisie H_{sw}^0 . La pente vaut $-H_{sw}^0/\Delta E_0^{1/2}$, valeur à partir de laquelle on peut déduire une estimation de ΔE_0 .

L'ajustement ainsi réalisé est représenté sur la figure 20. La droite en tirets indique l'ajustement linéaire moyen. En insert est représentée la courbe correspondant aux résultats expérimentaux [188].

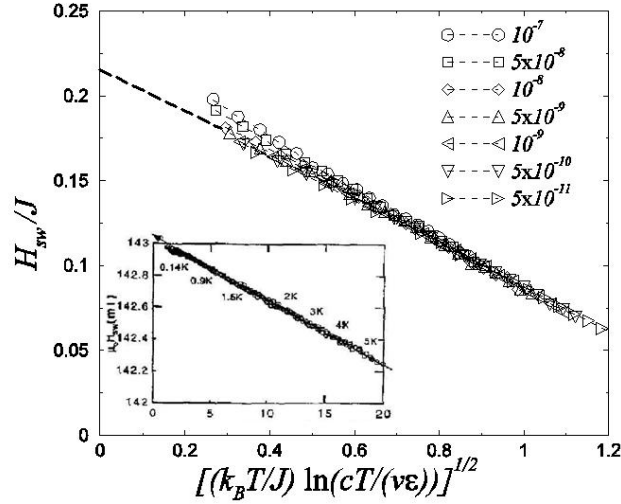


Figure 20. Courbe universelle des valeurs du champ de retournement moyen pour une particule de 33 spins avec $D = 0, 1J$, $5 \cdot 10^{-11} \leq v/J \leq 10^{-7}$ et $0, 01 \leq k_B T/J \leq 0, 1$. La figure en insert reproduit les résultats expérimentaux obtenus avec une nanoparticule de Co [188].

Seules les courbes correspondant aux plus petites valeurs du taux de variation du champ ($v/J \leq 10^{-8}$) se rassemblent sur une seule courbe maîtresse. Les données numériques associées aux plus grandes valeurs de v/J s'écartent de ce comportement d'échelle lorsque la température diminue. Cet écart est attribué à l'inefficacité de la procédure de retournement d'un unique spin à très basse température comme on l'a évoqué précédemment. Les résultats du meilleur ajustement sont obtenus avec : $c/k_B = 10^{-3}$ et $H_{sw}^0 = 0,215J$; ils conduisent à une valeur de l'ordonnée à l'origine égale à 0,219 (cohérente avec $H_{sw}^0 = 0,215J$) et pour la barrière d'énergie $\Delta E_0 = 2,8J$ légèrement inférieure à la valeur attendue $\Delta E_0 = NDS = 3,3J$. Comme le processus de retournement de l'aimantation est très sensible à la taille du système, nous avons étudié l'influence du nombre de spins sur le champ de retournement moyen pour $D = 0, 1J$. Pour $N = 7$ spins ($R = a$), la dépendance du module et des composantes de l'aimantation en fonction du temps ne présentent pas de réelle différence par rapport au cas $N = 33$ hormis une augmentation des fluctuations thermiques. Pour $N = 123$ ($R = 3a$), les 2 rapports $R/\lambda \simeq 1,5$ et $R/\delta \simeq 0,4$ sont plus proches des valeurs expérimentales. A nouveau, nous avons constaté que le retournement est uniforme et l'ajustement réalisé conduit à la même valeur de H_{sw}^0 que pour $N = 33$ ce qui est cohérent avec le fait que H_{sw}^0 ne doit pas dépendre de la taille de la particule. La

valeur de la barrière d'énergie en champ nul que l'on obtient alors ($\Delta E_0 = 7,2J$) est à nouveau significativement plus petite que la valeur attendue ($12,3J$). Dans le cas $N = 7$, nous observons, lorsque la température augmente, un changement de comportement qui est la traduction de la transition vers le régime super-paramagnétique, puisque la valeur nulle obtenue alors pour le champ de retournement moyen signifie que l'aimantation se retourne spontanément en champ nul. Nous avons également étudié l'influence de la constante d'anisotropie sur le champ de retournement afin de mettre en évidence, en particulier, la transition vers un régime de rotation non uniforme lorsque D augmente. Pour $D = 0,3J$ ($R/\delta \simeq 0,5$), le retournement n'est plus parfaitement uniforme puisque le saut du module de l'aimantation au cours du retournement est d'environ 10% lorsque $k_B T/J = 0,01$. Pour $D = J$ ($R/\delta \simeq 0,9$), le matériau de notre modèle est plus dur que le cobalt (le facteur de qualité $Q = (\lambda/\delta)^2$ vaut 0,8 dans notre cas alors qu'il est d'environ 0,2 pour le Co). Dans ce cas, le retournement de l'aimantation est clairement non uniforme puisque le saut du module de l'aimantation pendant le retournement est d'environ 36%. En raison de sa forte anisotropie, les spins se comportent approximativement comme des spins d'Ising et l'aimantation est toujours orientée selon l'axe x sauf pour des fluctuations de durée réduite. Dans ce cas, les spins situés près de la surface de la nanoparticule se retournent les premiers tandis que les autres spins avec une coordinence plus importante se retournent plus tard, c'est-à-dire pour une valeur plus grande du champ. Nous avons voulu vérifier la validité de l'expression de $H_{sw}(T, v)$ pour $D = 0,2J$ et $0,3J$ et nous avons donc tracé le champ de retournement moyen en fonction de $[k_B T \ln(cT/(v\epsilon))]^{1/2}$ de la même façon que précédemment (figure 21).

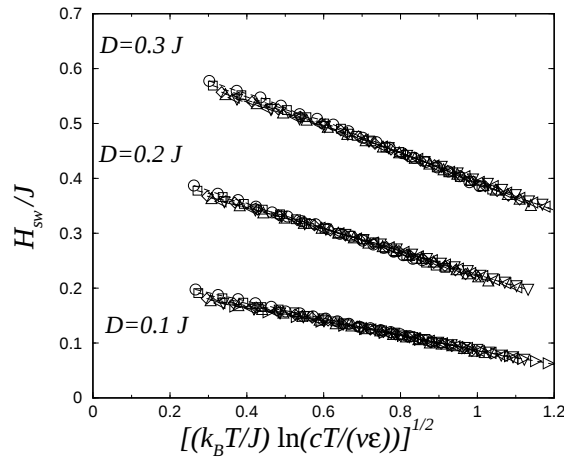


Figure 21. Courbes universelles des valeurs du champ de retournement moyen pour une particule de 33 spins avec $D = 0,1J$ pour $5.10^{-11} \leq v/J \leq 10^{-7}$, $D = 0,2J$ et $0,3J$ pour $5.10^{-10} \leq v/J \leq 10^{-7}$ et $0,01 \leq k_B T/J \leq 0,1$.

Bien que le retournement ne soit pas parfaitement uniforme, il est néanmoins possible de placer les points correspondant à $v/J \leq 10^{-8}$ sur une seule courbe maîtresse dont l'ajustement permet d'obtenir les valeurs de H_{sw}^0 proportionnelles à D/J en accord avec le modèle de Stoner-Wohlfarth [201] ($H_{\text{sw}}^0 = 0,215J$ pour $D = 0,1J$, $H_{\text{sw}}^0 = 0,430J$ pour $D = 0,2J$ et $H_{\text{sw}}^0 = 0,645J$ pour $D = 0,3J$).

Pour $D = J$, il n'est plus possible de placer les données à basse température sur une seule courbe maîtresse et on constate que les valeurs du champ de retournement sont significativement inférieures à celles attendues dans le cas de la rotation uniforme [208]. Finalement, à très basse température, le champ de retournement ne dépend plus de la constante d'anisotropie mais plutôt de l'interaction d'échange et de la coordinence. Nous avons donc été en mesure, dans le cadre de cette étude, de reproduire numériquement le modèle de Néel-Brown du retournement de l'aimantation pour des nanoparticules avec des valeurs réalistes de R/λ et de R/δ . En choisissant de façon appropriée la température et le taux de variation du champ, il a été possible de vérifier la validité de l'expression approchée du champ de retournement moyen. On constate finalement que notre estimation de H_{sw}^0 est indépendante de la taille de la particule - dans la gamme de tailles étudiées ici - et qu'elle varie linéairement avec la valeur de la constante d'anisotropie, comme prévu.

3. Étude de l'anisotropie magnétique dans les multicouches amorphes Fe/Dy

Cette étude a fait l'objet de la thèse d'Étienne Talbot que j'ai co-dirigée avec Denis Ledue. Pour mener à bien ce travail, nous avons bénéficié au total de près de 50000H monoprocasseur sur les calculateurs du CRIHAN, qui dispose de 176 processeurs *Power 5* d'une puissance théorique de 60Gflops/processeur.

Les systèmes intermétalliques métaux de transition - terres rares (MT-TR) sous forme de couches minces et de multicouches constituent un vaste domaine de recherche en raison de leur intérêt tant sur le plan fondamental que sur le plan des applications. En effet, ces structures, dont l'une des dimensions caractéristiques est nanométrique, présentent des propriétés particulièrement intéressantes liées à des effets de confinement bidimensionnel. Selon les systèmes, on peut noter l'apparition d'anisotropie magnétique différente de celle obtenue dans les composés massifs ou obtenir des couplages magnétiques particuliers entre couches adjacentes.

Notre travail a été centré sur l'anisotropie magnétique qui est perpendiculaire au plan des couches dans les multicouches amorphes ferrimagnétiques fer/dysprosium. En effet, l'origine précise d'une telle anisotropie magnétique dans ces composés intermétalliques n'est pas clairement décrite et les différents modèles antérieurs ne permettent d'expliquer que partiellement l'ensemble des résultats obtenus en fonction de la structure (alliages homogènes ou multicouches) et en fonction de l'élément de terre

rare impliqué. Ces modèles reposent soit sur une distribution anisotrope des paires MT-TR le long de la direction perpendiculaire [209], sur les interactions dipolaires [210], sur l'anisotropie structurale locale [211,212] ou sur l'anisotropie de type ion simple [213]. Récemment, les travaux de Tamion *et al.* sur les multicouches (Fe 3nm/Dy 2nm) [214,215] ont permis de corréler la constante d'anisotropie uniaxiale K_u à la température d'élaboration au moyen de mesures de sonde atomique tomographique, de magnétométrie SQUID et de réflectivité de neutrons polarisés. Il a été montré en particulier que l'anisotropie magnétique perpendiculaire est maximum pour une température d'élaboration $T_s = 570K$, c'est-à-dire pour des interfaces diffuses comme on peut le voir de façon qualitative sur la figure 22 qui montre la variation de la constante d'anisotropie uniaxiale K_u en fonction de la température de dépôt pour différentes températures de mesure. Cette constante est mesurée à partir des courbes d'aimantation sous champ $\mathbf{M}(\mathbf{H})$ effectuées dans les directions de facile et de difficile aimantation. Si $K_u < 0$, l'anisotropie est planaire tandis que si $K_u > 0$, elle est perpendiculaire, c'est-à-dire que l'aimantation moyenne est globalement perpendiculaire au plan des couches.

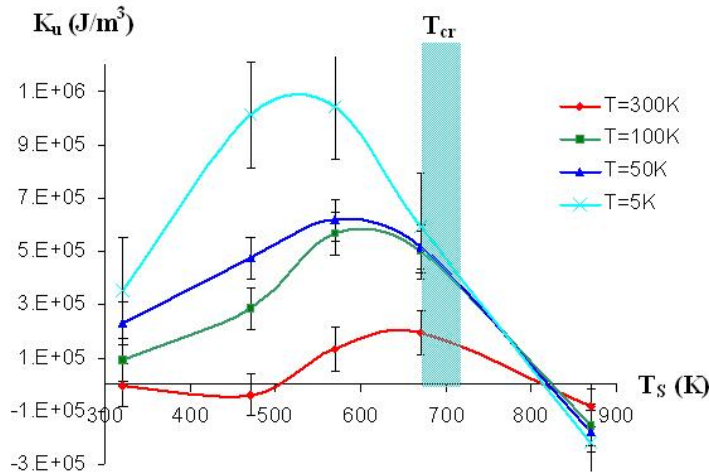


Figure 22. Evolution de la constante d'anisotropie magnétique K_u en fonction de la température de dépôt des multicouches T_s pour différentes températures de mesure. T_{CR} représente la température de cristallisation des échantillons.

Pour une température d'élaboration de 320K, la multicouche est constituée de couches pratiquement pures de Fe et de Dy amorphe avec des interfaces fines, alors que pour une température d'élaboration de 600K, les études structurales ont montré que la multicouche est composée alternativement de couches de Fe amorphe et de couches alliées de Fe-Dy. Au-dessus de 700K, la structure en couches est détruite, remplacée par des grains cristallins mélangés de Fe- α et de Fe₂Dy qui conduisent à une anisotropie planaire (figure 23).

On en conclut par conséquent que l'anisotropie magnétique perpendiculaire est plutôt due à la formation d'alliage amorphe Fe-Dy aux interfaces qu'à l'existence

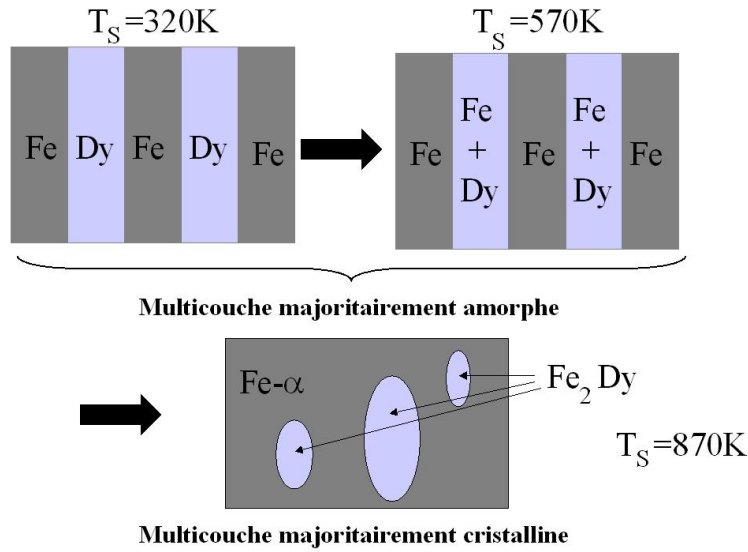


Figure 23. Représentation schématique de l'évolution de la structure des multicouches étudiées en fonction de la température du substrat lors des dépôts.

d'interfaces abruptes. Dans le cadre de cette étude, nous avons réalisé des simulations Monte Carlo sur des multicouches amorphes Fe/Dy afin d'examiner l'influence du profil de concentration sur les propriétés magnétiques, en particulier l'anisotropie magnétique macroscopique. Dans le cadre d'un modèle d'anisotropie structurale locale [211], nous avons étudié l'influence de la constante d'anisotropie ion-simple sur les atomes de terre-rare. Notre but est finalement de reproduire qualitativement les cycles d'hystérésis expérimentaux afin de proposer des mécanismes de retournement de l'aimantation en lien avec l'anisotropie magnétique locale et le profil de concentration.

Nous avons tout d'abord élaboré un modèle de simulation basé sur un réseau cubique à faces centrées qui rend compte de la compacité des multicouches amorphes étudiées [216-218]. Nous avons choisi le modèle de spins de Heisenberg pour lequel toutes les directions de l'espace sont équivalentes. Comme les multicouches sont amorphes, les interactions d'échange $J_{\text{Fe-Fe}}$ et $J_{\text{Fe-Dy}}$ sont modulées par une distribution gaussienne qui modélise la distribution des distances interatomiques dans les échantillons réels [219]. Par ailleurs, ces interactions, limitées aux premiers voisins, ont été ajustées afin de redonner la température de Curie du fer pur amorphe (270K) en se basant sur les résultats de Heiman *et al.* à partir de calculs de champ moyen sur des films minces amorphes Fe-Dy [216]. Elles varient linéairement en fonction de la concentration locale de fer, X_{Fe} , selon :

$$J_{\text{Fe-Fe}}(X_{\text{Fe}})/k_B = 77 + 449(1 - X_{\text{Fe}}) \text{ (en K)}, \quad (X_{\text{Fe}} > 0,4), \quad (66)$$

$$J_{\text{Fe-Dy}}(X_{\text{Fe}})/k_B = 8 - 198(1 - X_{\text{Fe}}) \text{ (en K)}, \quad (X_{\text{Fe}} > 0,4). \quad (67)$$

L'interaction d'échange $J_{\text{Dy-Dy}}$ quant à elle est connue pour être plus petite que les autres, elle a donc été considérée comme constante en fonction de la concentration. Sa

valeur a été estimée à partir de simulations Monte Carlo afin de retrouver la température de Curie du Dy pur amorphe [220] :

$$J_{\text{Dy-Dy}}/k_B = 6,5 \text{ (en K)}. \quad (68)$$

L'interaction $J_{\text{Fe-Dy}}$ étant fortement négative, elle donne lieu à un ordre ferrimagnétique, c'est-à-dire un alignement antiparallèle des moments magnétiques de Fe avec ceux de Dy à basse température. Cet ordre ferrimagnétique a été effectivement observé expérimentalement par des mesures de réflectivité de neutrons polarisés dont l'ajustement des spectres a été réalisé à partir d'hypothèses sur le profil d'aimantation basé sur nos simulations numériques [215].

L'introduction de profils de concentration réalistes le long de la direction de croissance de la multicouche est essentielle puisque la diffusion atomique semble avoir une influence majeure sur l'anisotropie magnétique macroscopique. Dans cette étude, nous avons donc considéré deux profils de concentration : le premier, appelé *abrupt*, correspond à une multicouche parfaite avec des interfaces planes et abruptes (figure 24(a)) ; le second profil est directement issu d'analyses en sonde atomique tomographique d'une multicouche (Fe 3nm/Dy 2nm) élaborée à 570K [214] (figure 24(b)).

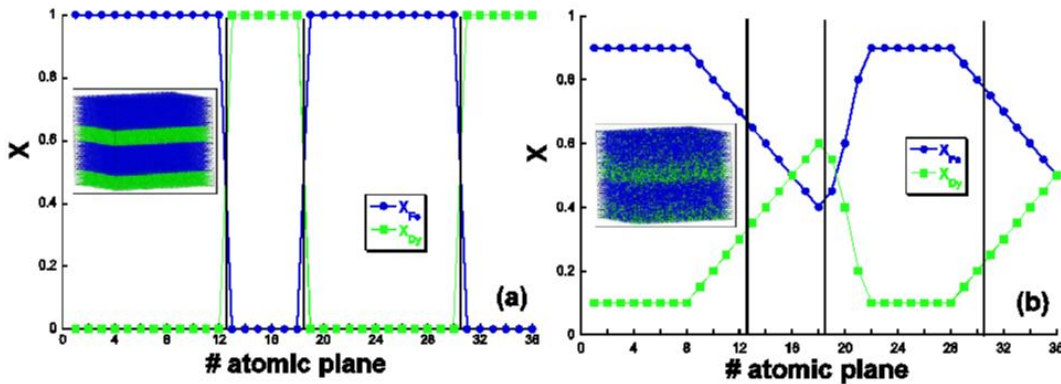


Figure 24. Concentration de chaque espèce en fonction du numéro du plan atomique pour les profils de concentration *abrupt* (a) et *sonde* (b).

Ce profil, appelé *sonde*, est constitué d'une région riche en Fe ($\text{Fe}_{90}\text{Dy}_{10}$) et d'une large région dans laquelle la concentration varie. Comme nous l'avons mentionné précédemment, c'est ce profil de concentration qui conduit au maximum d'anisotropie magnétique perpendiculaire observé expérimentalement [214,215].

Nous avons eu recours, pour introduire l'anisotropie magnétique à l'échelle atomique, à un modèle d'anisotropie structurale locale [211] qui semble être le

plus approprié pour décrire les résultats expérimentaux auxquels nous nous référons. Ce modèle est basé sur l'hypothèse que durant la croissance couche par couche des échantillons, de petites cellules partiellement cristallisées de Fe-Dy (sur deux à trois distances interatomiques) se créent, qui définissent en moyenne une direction préférentielle perpendiculaire au plan des couches. En effet, ces zones présentent vraisemblablement une structure réminiscente de celle des composés définis MT-TR, dont la symétrie hexagonale conduit à l'existence d'axes d'anisotropie en moyenne perpendiculaires au plan des couches. Ces amas localement ordonnés sont formés dans notre modèle de 13 atomes (un atome central de Fe et ses 12 premiers voisins) (figure 25). Parmi les 8 voisins qui ne sont pas dans le plan de l'atome central, de 2 à 4 atomes de Dy sont aléatoirement disposés afin d'obtenir un amas dont la concentration est proche de celle des composés définis.

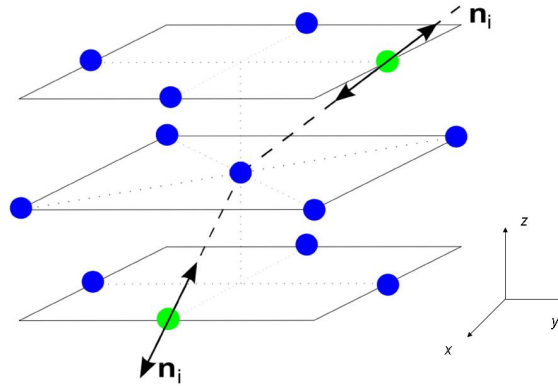


Figure 25. Représentation schématique des amas ordonnés. Les atomes de Fe sont représentés en foncé, les atomes de Dy en clair. Les flèches représentent les directions d'anisotropie locale sur les sites de Dy.

Comme les atomes de TR sont caractérisés par une forte anisotropie intrinsèque due à la forme particulière de leurs orbitales $4f$, nous avons donc considéré dans le hamiltonien un terme d'anisotropie de site pour tous les atomes de Dy. Les axes d'anisotropie des atomes de Dy appartenant aux amas sont parallèles aux liaisons Fe-Dy (le fer étant ici l'atome central de l'amas). Cela conduit donc à une direction d'anisotropie en moyenne perpendiculaire au plan des couches. Pour les autres atomes de Dy (très majoritaires en nombre) qui n'appartiennent pas aux amas, nous avons considéré une direction d'anisotropie magnétique aléatoire en raison de la structure amorphe des multicouches étudiées. L'énergie du système est donc définie de la façon suivante :

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - D_{\text{Dy}} \left(\sum_{i \notin \text{amas}} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{n}_i)^2 + \sum_{i \in \text{amas}} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{z}_i)^2 \right), \quad (69)$$

où $\mathbf{S}_i$ est le spin du site i , J_{ij} est l'interaction d'échange entre les plus proches voisins des sites i et j , D_{Dy} est la constante d'anisotropie pour les sites de Dy, $\mathbf{n}_i$ est un vecteur

unitaire de direction aléatoire au site i (de Dy) et $\mathbf{z}_i$ est un vecteur unitaire le long de l'axe local d'anisotropie des sites de Dy appartenant aux amas. Comme le coefficient d'anisotropie D_{Dy} n'est pas déterminé de façon précise dans les multicouches amorphes, nous le considérerons par la suite comme un paramètre libre, avec une valeur identique pour tous les sites de Dy (dans les amas ou dans la matrice amorphe). De même, la concentration d'amas, qui est définie comme le nombre total d'atomes inclus dans les amas divisé par le nombre total d'atomes, est un paramètre libre dans les simulations puisqu'il ne peut pas être évalué expérimentalement.

L'étude des propriétés magnétiques d'équilibre (aimantation, susceptibilité magnétique) a été obtenue par la méthode de simulation Monte Carlo basée sur l'algorithme de Metropolis dans l'ensemble canonique [25,206]. Les résultats concernant l'étude des processus de retournement de l'aimantation ont, eux, été obtenus en utilisant la méthode Monte Carlo quantifiée en temps qui permet d'étudier la dynamique de retournement du système magnétique par simulation numérique [39]. Ces méthodes de simulation ont été décrites au premier chapitre. L'ensemble des résultats est issu de moyennes sur différentes configurations de désordre afin d'obtenir des propriétés caractéristiques d'échantillons macroscopiques.

Nous nous sommes intéressés à l'influence du profil de concentration le long de la multicouche sur l'ordre magnétique. Nous avons tout d'abord mis en évidence le fait que la température de Curie augmente avec la diffusion dans la multicouche. En effet, l'interaction d'échange $J_{\text{Fe-Dy}}$ qui couple les moments magnétiques de Fe et de Dy favorise une mise en ordre magnétique à d'autant plus haute température que la multicouche est diffuse. Cette température de Curie varie de $T_C = 280\text{K}$ pour la multicouche dite *abrupte* (c'est-à-dire avec des couches pures en Fe et en Dy) à $T_C = 325\text{K}$ dans le cas du profil *sonde* (figure 26). On observe que le profil *abrupt* est caractérisé par deux mises en ordre magnétiques séparées aux températures respectives de 285K et 150K correspondant aux couches de Fe et de Dy. Dans le cas du profil *sonde*, les 2 sous-réseaux s'ordonnent à la même température (325K) en raison du mélange chimique entre les 2 espèces. On constate ainsi une forte influence du profil de concentration sur l'aimantation globale de la multicouche, même si les concentrations globales sont identiques dans les 2 cas ($X_{\text{Fe}} = 2/3$).

Nous nous sommes également intéressés à l'influence de la constante d'anisotropie magnétique sur les sites de Dy, et nous obtenons une diminution de l'aimantation à basse température lorsque cette constante augmente [221]. Ce résultat se retrouve sur l'ensemble des profils de concentration étudiés et l'aimantation est la plus faible pour un profil de concentration *abrupt*. Cet effet est attribué à l'existence de spérilmagnétisme dû à la compétition entre les différents termes d'anisotropie magnétique et aux interactions d'échange. Afin d'analyser quantitativement ce phénomène, nous avons calculé l'aimantation dans chaque plan ainsi que l'histogramme de la composante perpendiculaire des moments magnétiques pour chaque plan et chaque sous-réseau [222]. Les résultats sont représentés à $T = 1\text{K}$ pour $D_{\text{Dy}}/k_B = 50\text{K}$ sur les figures 27 et 28 pour les profils *abrupt* et *sonde*.

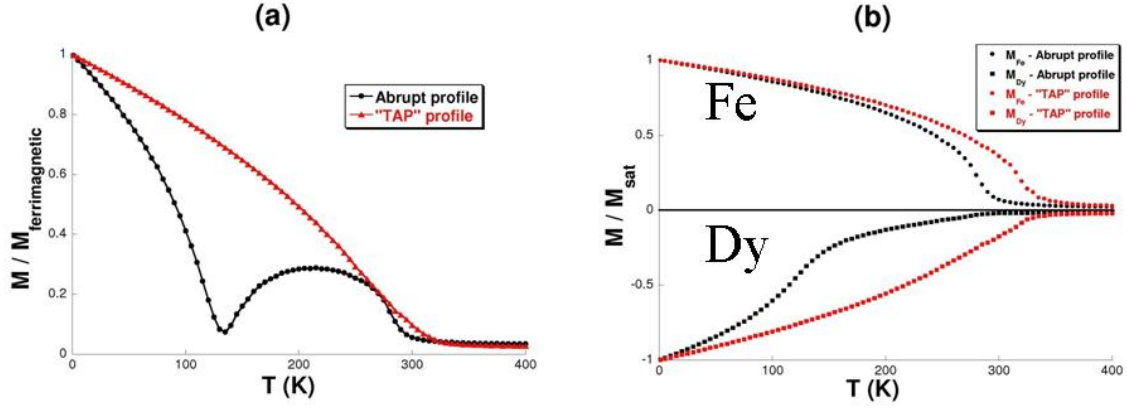


Figure 26. Variation thermique de l'aimantation réduite globale (a) et par sous-réseau (b) d'une bicouche (Fe 3nm/Dy 2nm) avec les profils de concentration *abrupt* et *sonde* (noté "TAP" profile).

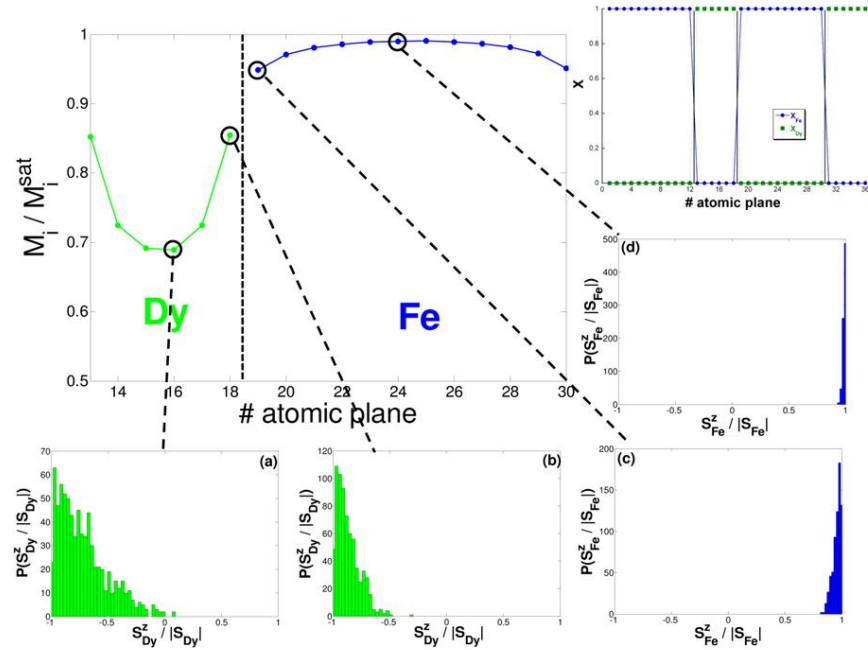


Figure 27. Aimantation réduite de chaque plan atomique d'une multicouche à basse température ($T = 1K$) avec le profil de concentration *abrupt* contenant 5% d'amas et pour $D_{\text{Dy}}/k_B = 50K$. Distribution de la composante magnétique perpendiculaire dans la couche de Dy et dans la couche de Fe ((a) Dy - plan de coeur ; (b) Dy - plan d'interface ; (c) Fe - plan d'interface ; (d) Fe - plan de coeur).

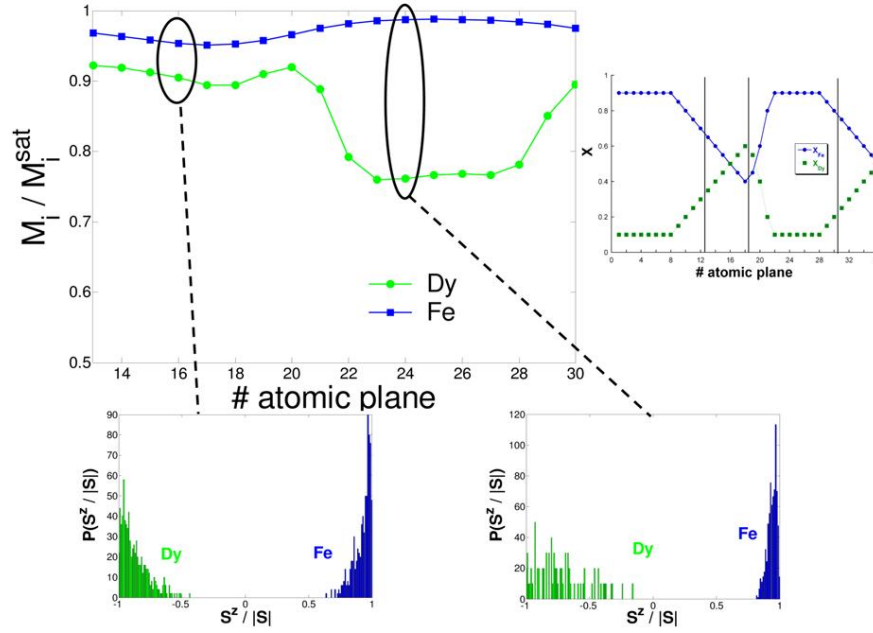


Figure 28. Aimantation réduite de chaque plan atomique d'une multicouche à basse température ($T = 1K$) avec le profil de concentration *sonde* contenant 5% d'amas et pour $D_{Dy}/k_B = 50K$. Distribution de la composante magnétique perpendiculaire dans le sous-réseau de Dy et dans le sous-réseau de Fe ((a) plan 16 - $X_{Fe} = 0, 50$; (b) plan 24 - $X_{Fe} = 0, 90$).

Dans le cas du profil *abrupt*, on constate clairement l'évolution de l'aimantation par plan qui n'est pas homogène à l'intérieur de la multicouche (figure 27). La diminution de l'aimantation est due à l'élargissement de la distribution de la composante perpendiculaire des moments atomiques. De façon plus précise, loin de l'interface, la distribution est très large dans les plans atomiques de Dy (figure 27(a)) en raison de la valeur importante du rapport $D_{Dy}/J_{Dy-Dy} = 7,7$. A l'interface, la largeur de la distribution est minimum dans la couche de Dy (figure 27(b)) tandis qu'elle est maximum dans la couche de Fe (figure 27(c)) en raison du fort couplage Fe-Dy. Finalement, la distribution est proche d'un pic de Dirac dans le coeur de la couche de Fe puisqu'il n'y a pas d'anisotropie magnétique (figure 27(d)). Dans le cas du profil de *sonde* (figure 28), la variation de l'aimantation par plan de chaque sous-réseau est différente du cas précédent puisqu'elle dépend de la concentration locale. On observe que l'aimantation du sous-réseau de Fe atteint un maximum pour les plans fortement concentrés en Fe ($X_{Fe} = 0, 90$) tandis que pour le sous-réseau de Dy, l'aimantation par plan présente un maximum pour un plan avec X_{Fe} proche de 0,4. Afin d'expliquer ce phénomène, nous avons calculé dans le tableau 2 l'amplitude de chaque terme d'énergie (par atome) défini de la façon suivante :

$$E_{\text{anis. aléatoire}}^{\text{Dy}} = (1 - X_{Fe} - X_{Dy}^{\text{amas}})D_{Dy}S_{Dy}^2, \quad (70)$$

$$E_{\text{éch}}^{\text{Dy-Dy}} = (1 - X_{\text{Fe}})^2 J_{\text{Dy-Dy}} S_{\text{Dy}}^2, \quad (71)$$

$$E_{\text{éch}}^{\text{Fe-Dy}} = X_{\text{Fe}}(1 - X_{\text{Fe}}) J_{\text{Fe-Dy}} S_{\text{Fe}} S_{\text{Dy}}, \quad (72)$$

$$E_{\text{éch}}^{\text{Fe-Fe}} = X_{\text{Fe}}^2 J_{\text{Fe-Fe}} S_{\text{Fe}}^2, \quad (73)$$

où $X_{\text{Dy}}^{\text{amas}}$ est la fraction atomique de Dy dans les amas.

Table 2. Energie d'anisotropie magnétique et énergies d'échange pour 3 plans atomiques typiques avec le profil *sonde*.

plan	X_{Fe}	$E_{\text{anis. aléatoire}}^{\text{Dy}}$ (K)	$E_{\text{éch}}^{\text{Dy-Dy}}$ (K)	$E_{\text{éch}}^{\text{Fe-Dy}}$ (K)	$E_{\text{éch}}^{\text{Fe-Fe}}$ (K)
13	0.65	102.34	4.97	49.25	49.34
16	0.50	146.88	10.16	61.14	21.77
24	0.90	29.30	0.41	5.24	86.29

Ces résultats montrent que le profil de l'aimantation le long de la multicouche n'est pas homogène, ce qui avait déjà été observé expérimentalement sur ces échantillons à partir de mesures de réflectivité de neutrons polarisés [216]. Nous mettons également en évidence le fait que, contrairement à ce qui a été annoncé dans plusieurs publications [223-225], la distribution des moments atomiques autour de la direction de l'aimantation moyenne dans chaque plan n'est pas uniforme mais plutôt gaussienne pour les deux profils de concentration.

Nous avons également mené une étude détaillée de l'influence du profil de concentration sur les modes de retournement de l'aimantation dans le cadre de deux modèles d'anisotropie [226]. La première partie de cette étude a été réalisée en considérant une anisotropie uniaxiale texturée dans la direction perpendiculaire au plan des couches sur l'ensemble des sites de Dy. Nous mettons en évidence que pour des multicouches avec des interfaces abruptes, l'aimantation se retourne suivant un mode non uniforme avec la création de parois d'interface dans la couche de Fe. Une multicouche plus diffuse donne lieu à un retournement de l'aimantation suivant des processus collectifs en bon accord quantitatif avec le modèle de Stoner-Wohlfarth [201].

Dans une seconde partie, nous avons étudié les modes de retournement de l'aimantation dans le cadre du modèle présenté précédemment d'amas ordonnés (avec une concentration d'amas de 5%) en compétition avec l'anisotropie aléatoire. Pour une multicouche avec des interfaces abruptes, le résultat marquant de cette étude est d'une part l'ouverture des cycles obtenus pour un champ magnétique appliqué dans le plan des couches et d'autre part la similarité entre les cycles réalisés dans les deux directions, perpendiculaire et parallèle au plan des couches (figure 29).

De façon plus précise, pour $D_{\text{Dy}}/k_{\text{B}} = 10\text{K}$, les cycles d'hystérésis sont approximativement ceux d'un système avec anisotropie magnétique perpendiculaire : le cycle pour un champ appliqué perpendiculaire est pratiquement carré et il n'y a pas de rémanence lorsque le champ est appliqué dans le plan. Ce comportement est

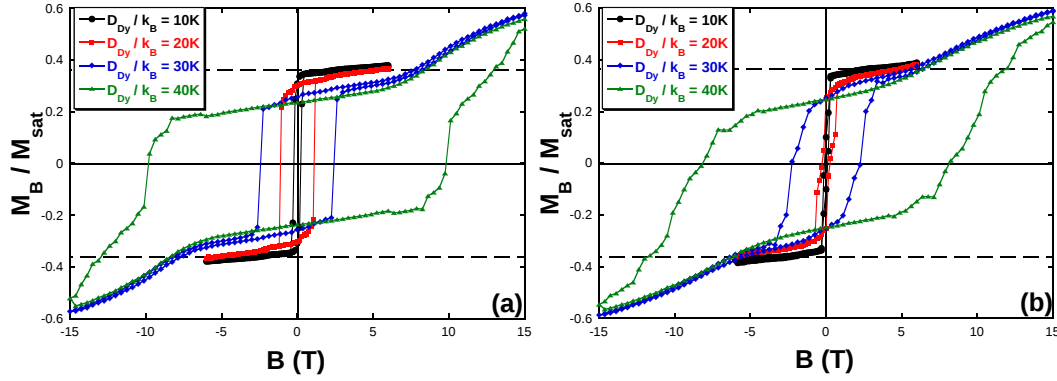


Figure 29. Cycles d'hystérésis de multicouches Fe/Dy avec un profil *abrupt*, une concentration d'amas de 5% à $T = 1\text{K}$ pour différentes valeurs de la constante d'anisotropie du Dy ((a) champ appliqué dans la direction perpendiculaire au plan des couches ; (b) champ appliqué dans le plan des couches). Les lignes horizontales en tirets correspondent à $M_{\text{ferrimagnétique}}/M_{\text{sat}}$.

dû à l'anisotropie des amas et le mécanisme de retournement de l'aimantation est proche, dans ce cas, de la rotation uniforme. Lorsque $D_{\text{Dy}}/k_B = 30\text{K}$ ou 40K , on observe cette fois que le cycle est ouvert également pour un champ appliqué dans le plan, indiquant ainsi un effet significatif de l'anisotropie aléatoire. Nous avons donc tracé le profil de l'aimantation réduite (figure 30(a)) et dessiné les configurations magnétiques correspondantes (figure 30(b)) pour différentes valeurs du champ appliqué (perpendiculaire à la multicouche) à $T = 1\text{K}$.

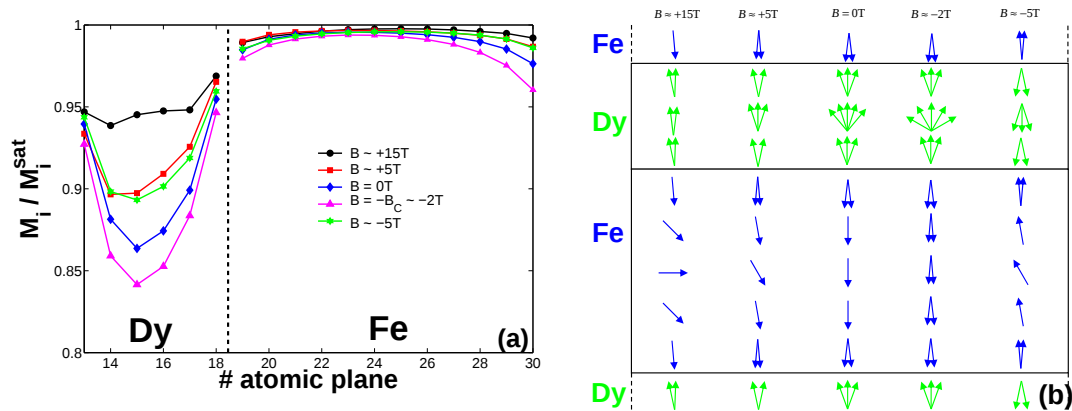


Figure 30. (a) Aimantation réduite de chaque plan atomique d'une multicouche avec un profil *abrupt* pour $D_{\text{Dy}}/k_B = 30\text{K}$ à $T = 1\text{K}$ et pour différentes valeurs du champ magnétique appliqué dans la direction perpendiculaire. (b) Configurations schématiques correspondantes pour différentes valeurs du champ magnétique appliqué.

Finalement, l'anisotropie magnétique aléatoire augmente significativement les valeurs du champ coercitif lorsque la constante d'anisotropie D_{Dy} est suffisamment

grande. En effet, pour les petites valeurs de D_{Dy} , le retournement de l'aimantation est pratiquement uniforme et l'effet de l'anisotropie magnétique aléatoire est très faible. Par ailleurs, le fait d'augmenter D_{Dy} conduit à un processus de retournement non uniforme ce qui signifie que chaque moment magnétique est sensible, individuellement, au champ d'anisotropie locale qui est dû à l'anisotropie magnétique aléatoire pour les sites de Dy de la matrice. On peut enfin relever que, bien que la fraction d'atomes de Dy dans les amas relativement au nombre total d'atomes de Dy soit constante (3,4%), il est surprenant de constater que la multicouche se comporte comme un système à anisotropie uniaxiale lorsque D_{Dy} est petit ou un système avec anisotropie magnétique aléatoire lorsque D_{Dy} est grand.

Nous avons étudié de la même façon la multicouche avec le profil *sonde*, situation qui nous permet de faire varier la concentration d'amas, ce qui n'était pas possible avec le profil *abrupt*. Sur la figure 31 sont représentés les cycles d'hystérésis pour un champ appliqué perpendiculaire au plan de la multicouche et dans le plan pour différentes concentrations d'amas à $T = 1\text{K}$ et $D_{\text{Dy}}/k_{\text{B}} = 30\text{K}$.

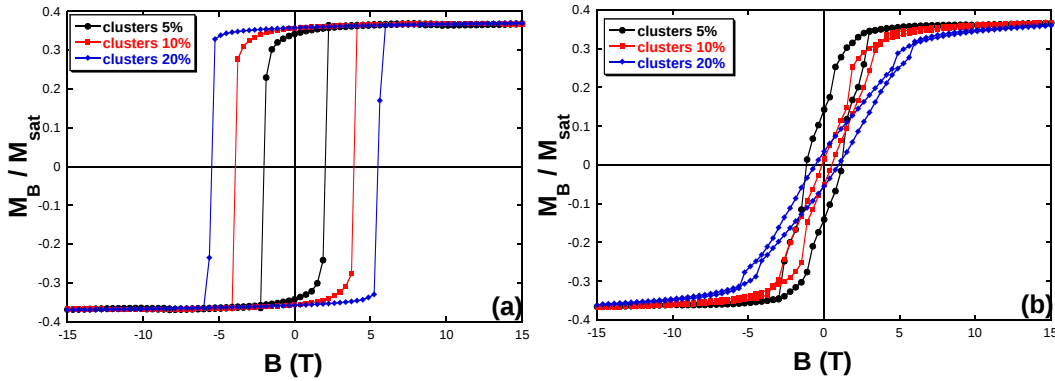


Figure 31. Cycles d'hystérésis d'une multicouche Fe/Dy avec le profil *sonde* à $T = 1\text{K}$ et $D_{\text{Dy}}/k_{\text{B}} = 30\text{K}$ pour différentes valeurs de la concentration d'amas ((a) champ appliqué dans la direction perpendiculaire au plan des couches, (b) champ appliqué dans le plan des couches).

Le principal effet de la concentration d'amas est d'augmenter le champ coercitif. Les cycles de la figure 31(a) montrent un axe facile selon la perpendiculaire au plan du film. L'influence de l'anisotropie magnétique aléatoire se manifeste d'une part par la faible décroissance de l'aimantation avant le retournement (pour $c_{\text{amas}} = 5\%$ et 10%), d'autre part par l'existence de cycles légèrement ouverts lorsque le champ est appliqué dans la direction du plan du film (figure 31(b)). Ces résultats montrent que le profil *sonde* favorise l'anisotropie perpendiculaire en comparaison avec le profil *abrupt*. Pour ce dernier, on observe un comportement avec anisotropie magnétique perpendiculaire seulement lorsque la valeur de la constante d'anisotropie du Dy est inférieure à 30K . Sur le plan expérimental, les cycles d'hystérésis mesurés sur des multicouches élaborées à basse température, avec un profil de concentration proche du profil *abrupt* ne présentent

pas d'anisotropie magnétique perpendiculaire contrairement aux échantillons élaborés à $T_S = 570\text{K}$. Cela signifie donc que notre modèle de simulation peut être comparé qualitativement au cas expérimental lorsque la valeur de la constante d'anisotropie D_{Dy}/k_B est plus grande que 30K . Pour $D_{\text{Dy}}/k_B = 30\text{K}$ et $c_{\text{amas}} = 5\%$, la multicouche avec le profil *sonde* se comporte approximativement comme un système à anisotropie uniaxiale contrairement à la multicouche avec un profil *abrupt*.

L'influence de la température a également été étudiée dans le cas du profil *sonde* et les cycles obtenus ont été comparés aux cycles expérimentaux pour une multicouche (Fe 3nm/Dy 2nm) élaborée à 570K . Les cycles simulés et expérimentaux à $T = 5\text{K}$, 50K et 100K sont représentés sur la figure 32. Les résultats simulés ont été obtenus avec

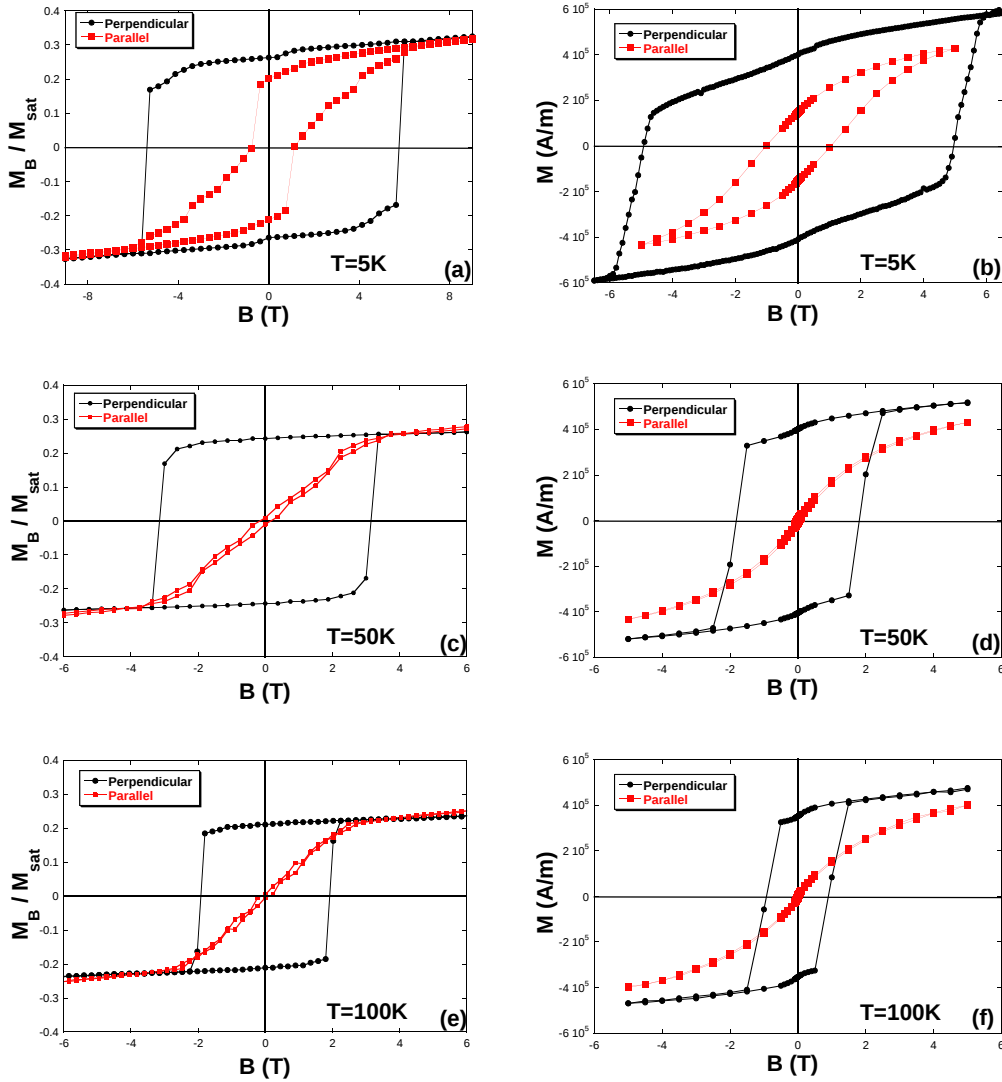


Figure 32. Cycles d'hystérésis de multicouches Fe/Dy à $T = 5, 50$ et 100K . (a,c,e) Cycles simulés avec le profil *sonde*, $D_{\text{Dy}}/k_B = 40\text{K}$ et $c_{\text{amas}} = 10\%$. (b,d,f) Cycles expérimentaux pour une température d'élaboration de 570K .

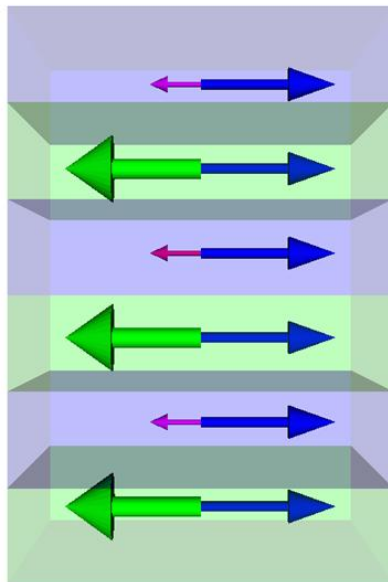
$D_{\text{Dy}}/k_{\text{B}} = 40\text{K}$ et $c_{\text{amas}} = 10\%$, paramètres permettant d'obtenir le meilleur accord avec les cycles expérimentaux à basse température.

On constate que la dépendance avec la température des cycles simulés est en bon accord qualitatif avec les cycles expérimentaux. A chaque température, la forme des cycles d'hystérésis indique un axe facile perpendiculaire au plan du film. L'augmentation de la température permet de mettre en évidence une décroissance importante de l'effet de l'anisotropie aléatoire puisque l'on constate une fermeture des cycles dans la direction parallèle. On observe également une diminution à la fois du champ coercitif et de l'aimantation lorsque la température augmente. Cette décroissance du champ coercitif est due à la diminution de la constante d'anisotropie effective en lien avec les fluctuations thermiques des moments atomiques. Ces observations peuvent être interprétées à nouveau par le fait que pour le profil *sonde*, le retournement de l'aimantation est essentiellement contrôlé par le sous-réseau de Dy puisqu'il n'existe pas de compensation magnétique donc l'ordre demeure ferrimagnétique (ou spérimagnétique) à toute température. L'anisotropie magnétique aléatoire influence fortement les processus de retournement de l'aimantation. Pour un ordre spérimagnétique donné, la coercivité augmente par rapport au cas d'une anisotropie magnétique uniaxiale.

4. Conclusion

L'application des techniques de simulation numérique Monte Carlo à l'étude de systèmes magnétiques réels nous a permis de conforter certains modèles théoriques comme les modèles de Néel-Brown et de Stoner-Wohlfarth pour le retournement de l'aimantation ou le modèle d'anisotropie structurale locale pour expliquer l'existence d'une anisotropie magnétique macroscopique dans les multicouches amorphes Fe/Dy. Ainsi, nous avons mis en évidence le fait que le retournement de l'aimantation par rotation uniforme d'une structure ferrimagnétique peut devenir non uniforme pour une structure spérimagnétique avec une augmentation de la coercivité. Par ailleurs, la comparaison précise avec les résultats expérimentaux permet d'identifier les paramètres physiques les plus pertinents qui doivent nécessairement être pris en compte dans la réalisation de la modélisation. En particulier, dans le cas de l'étude des multicouches Fe/Dy, on constate la nécessité d'intégrer dans notre modèle un terme d'anisotropie aléatoire et un terme d'anisotropie en moyenne uniaxiale combinés à des profils de concentration dépendants de la température d'élaboration. Nous avons montré que dans ces systèmes, l'anisotropie aléatoire est responsable de l'ouverture des cycles d'hystérésis à basse température mais que l'influence de ce terme dépend très fortement du profil de concentration et donc de la température d'élaboration des multicouches.

Projet de recherche



1. Introduction

Les perspectives de recherche que nous pouvons explorer à la fin de ce mémoire s'inscrivent dans le cadre de collaborations à échéance immédiate ou à moyen terme. Dans la continuité des travaux menés sur la modélisation des propriétés de matériaux magnétiques nanostructurés, nous avons débuté une collaboration avec Catherine Dufour de l'Institut Jean Lamour de l'université Henri Poincaré, Nancy 1, et Saoussen Djedaï, doctorante de l'université de Tebessa en Algérie sur la modélisation des profils d'aimantation dans les super-réseaux $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$. Dans le cadre de cette collaboration, Saoussen Djedaï va effectuer un séjour de 18 mois au Groupe de Physique des Matériaux à Rouen à compter de l'automne 2009 afin de finaliser sa thèse de doctorat.

Par ailleurs, une étude sur la modélisation du renversement d'aimantation dans des multicouches $\text{IrMn}/\text{Co}/\text{Pt}$ à anisotropie d'échange est engagée au sein du laboratoire dans le cadre d'une thèse co-encadrée par Denis Ledue et moi-même qui va débiter en octobre 2009. Il s'agit d'un sujet à nouveau connecté à une étude expérimentale menée au sein du Groupe de Physique des Matériaux (Luc Lechevallier et Rodrigue Lardé) en collaboration avec le laboratoire SPINTEC à Grenoble.

Enfin, dans le cadre d'un projet à plus long terme, nous souhaitons poursuivre nos travaux de modélisation du comportement d'agrégats ferromagnétiques, en nous intéressant en particulier à l'influence des interactions dans les systèmes dilués, en collaboration avec les laboratoires LPMCN de Lyon (Véronique Dupuis et Alexandre Tamion), Institut Jean Lamour de Nancy (Daniel Lacour et François Montaigne) et LAMPS de Perpignan (Hamid Kachkachi).

2. Propriétés magnétiques de multicouches cristallines

2.1 Profil d'aimantation dans des super-réseaux $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$

Les hétérostructures intermétalliques métaux de transition - terre rare permettent la fabrication de parois de domaines artificielles par le biais du couplage d'échange négatif à l'interface entre les couches dures et douces. Des exemples typiques de tels composés sont les super-réseaux $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$ constitués d'une alternance de couches ferrimagnétiques dures (DyFe_2) et de couches ferrimagnétiques douces (YFe_2).

Les composés DyFe_2 et YFe_2 présentent une structure cristallographique de type "phases de laves" et cristallisent dans le réseau cubique de type MgCu_2 [227,228]. Les propriétés magnétiques de ces systèmes dépendent principalement des épaisseurs respectives des couches (de l'ordre de quelques nm au maximum), ainsi que de la température. On peut en particulier observer expérimentalement l'existence d'une paroi d'interface localisée dans la couche douce à basse température, l'existence dans certains cas d'une coercivité négative ou encore un déplacement de la paroi d'interface de la

couche douce vers la couche dure lorsque la température augmente. Dans les composés massifs DyFe_2 et YFe_2 , l'anisotropie magnétique est uniaxiale dans les directions respectives $[001]$ et $[111]$. Pour la couche dure, cette forte anisotropie résulte de l'interaction de champ cristallin avec l'ion de terre rare Dy [229]. Dans le cas de la couche douce, cette anisotropie est nettement plus faible, voire négligeable. L'élaboration de super-réseaux par épitaxie par jets moléculaires induit des contraintes dans la couche mince qui a pour conséquence de réorienter la direction de facile aimantation de la couche dure à haute température [230]. Elle passe de la direction $[001]$ à basse température à la direction $[1\bar{1}0]$ à température ambiante. En raison de la forte interaction d'échange entre atomes de fer, la température de Curie de ces systèmes est d'environ 600K [227,228]. Finalement, du fait des propriétés magnétiques de chaque élément, on peut représenter schématiquement l'état fondamental de ces super-réseaux comme le montre la figure 33 avec ou sans champ magnétique appliqué.

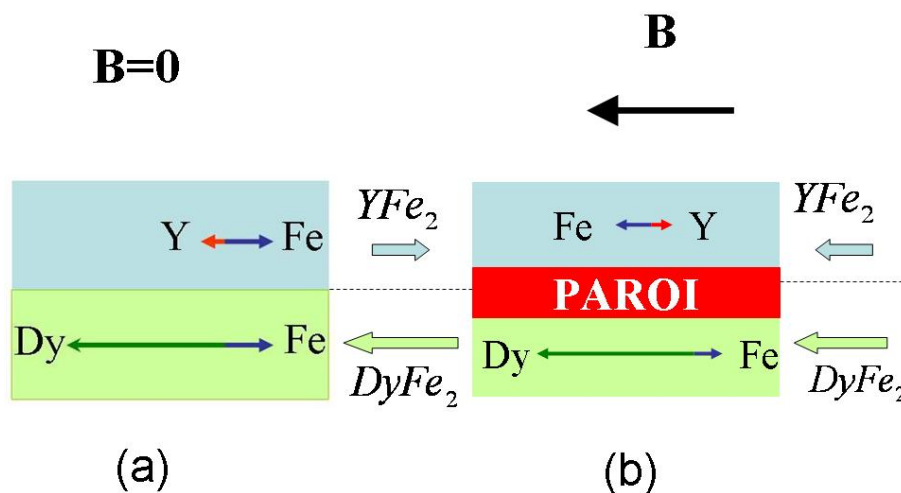


Figure 33. Représentation schématique de l'ordre magnétique des super-réseaux $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$ ((a) état fondamental ; (b) état stable en présence d'un champ magnétique extérieur).

Sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, la contribution Zeeman peut fortement modifier l'équilibre énergétique. En effet, en plus du couplage anti-ferromagnétique entre les moments magnétiques des couches de DyFe_2 et de YFe_2 , il apparaît un terme d'énergie Zeeman qui tend à aligner tous les moments magnétiques dans la direction du champ appliqué. On aura donc une compétition entre ces différents termes, compétition qui dépendra des épaisseurs des couches mais aussi de la température de mesure. En fonction de l'intensité du champ magnétique appliqué, on peut observer la création d'une paroi d'interface, c'est-à-dire une zone de transition permettant d'accomoder les contraintes générées par cette compétition énergétique

(figure 33). La création de cette paroi est principalement contrôlée, d'une part par la compétition énergétique due au champ magnétique, à l'échange et à l'anisotropie de la couche dure, d'autre part par les épaisseurs relatives des couches. Dans une approche continue, on peut estimer la dimension caractéristique de la paroi par l'expression :

$$\delta(B) = \pi \sqrt{\frac{A}{K + MB}}, \quad (74)$$

où A est la constante d'échange effective par unité de longueur qui tient compte des différentes interactions d'échange, K est la constante par unité de volume, M est l'aimantation de l'échantillon et B est le champ magnétique appliqué [231].

Nous souhaitons donc étudier, par simulation Monte Carlo, les propriétés magnétiques de ces super-réseaux en nous intéressant en particulier au processus de retournement de l'aimantation sous l'effet d'un champ magnétique en fonction des épaisseurs de chacune des couches et de la température. Un certain nombre de résultats ont déjà été obtenus dans le cadre de la fin de la thèse d'Étienne Talbot et du stage de Master 2 de Thomas Philippe.

Sur le plan expérimental, de nombreuses études ont été menées sur les super-réseaux $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$ et mettent en évidence une grande variété de comportements magnétiques différents, avec essentiellement trois comportements différents pour le retournement de l'aimantation [232-237].

(a) Scénario de type "bloc dur"

Le premier scénario correspond à un comportement de bloc rigide, caractérisé par un cycle d'hystérésis carré, où l'aimantation globale du système se retourne pour une certaine valeur du champ. Ce comportement est caractéristique d'un matériau magnétique dur : les moments de YFe_2 restent toujours antiparallèles à ceux de DyFe_2 quelle que soit la valeur du champ magnétique appliqué, le couplage antiferromagnétique les concernant est toujours respecté (il n'y a pas de paroi magnétique dans la phase douce). Ce scénario intervient pour un rapport entre les épaisseurs $e_{\text{DyFe}_2}/e_{\text{YFe}_2} = 2$ (ou plus) à 0K. A température ambiante on constate que le cycle se contracte fortement (figure 34(a)).

(b) Scénario de type "exchange-spring"

Le comportement est caractérisé par un retournement de l'aimantation en deux étapes distinctes : une phase progressive correspondant à la dilatation de la paroi d'interface dans la couche magnétique douce YFe_2 et une phase brutale correspondant au retournement de la couche dure DyFe_2 . Ce scénario a été observé à basse température pour des super-réseaux dont le rapport entre les épaisseurs est proche de 1 ($e_{\text{DyFe}_2}/e_{\text{YFe}_2} = 0,75$ par exemple). Par ailleurs, mis à part l'effet de contraction du cycle d'hystérésis mentionné précédemment, le comportement magnétique est comparable à basse température et à température ambiante (figure 34(b)).

(c) *Retournement en premier lieu de la phase dure*

Cette situation correspond à un scénario plus marginal qui intervient pour des super-réseaux pour lesquels l'épaisseur de la couche YFe_2 est très supérieure à celle de la couche DyFe_2 ($e_{\text{DyFe}_2}/e_{\text{YFe}_2} = 0,25$) et à température relativement plus élevée ($T=200\text{K}$). La caractéristique principale de ce cycle est de présenter un premier saut de l'aimantation (boucle en champ positif) correspondant au retournement de la phase dure (figure 34(c)).

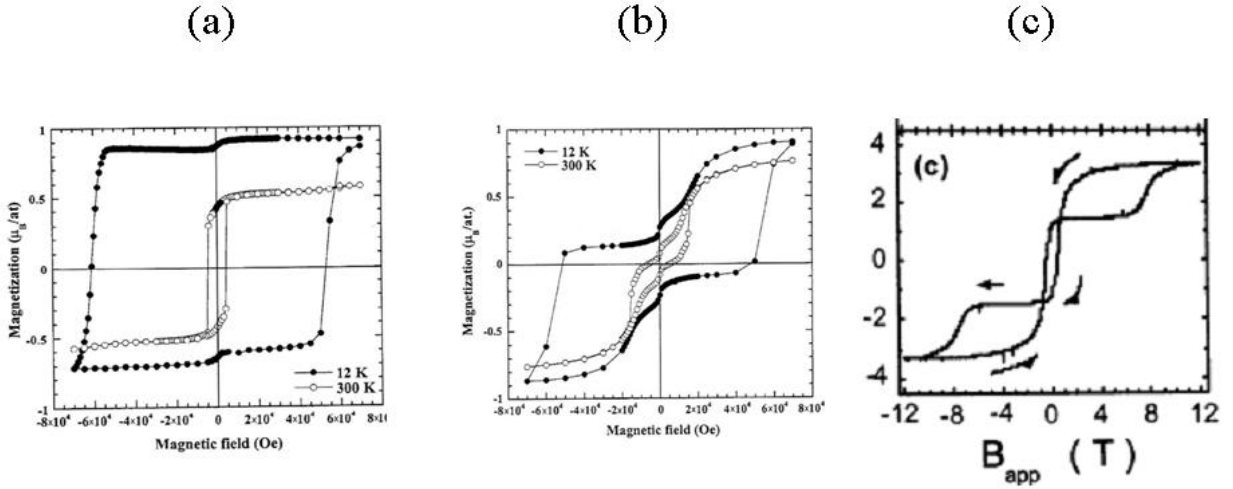


Figure 34. Cycles d'hystérésis expérimentaux de super-réseaux $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$ ((a) DyFe_2 (10nm)/ YFe_2 (5nm) [234] ; (b) DyFe_2 (10nm)/ YFe_2 (13nm) [234] ; (c) DyFe_2 (5,5nm)/ YFe_2 (22nm) [237]).

D'un point de vue qualitatif, nous sommes en mesure de retrouver ces différents comportements à basse température en faisant varier les épaisseurs des couches de DyFe_2 et d' YFe_2 , en se basant sur un modèle de Heisenberg 3D avec interfaces abruptes :

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - D(\text{Dy}) \sum_{i \in \text{Dy}} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{x})^2 - D(\text{Y}) \sum_{i \in \text{Y}} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{x})^2 - \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{m}_i. \quad (75)$$

Ainsi par exemple, dans le cas des scénarios (b) et (c), les cycles simulés sont reproduits à basse température pour $e_{\text{DyFe}_2}/e_{\text{YFe}_2} = 0,5$ (figure 35(a)) et $e_{\text{DyFe}_2}/e_{\text{YFe}_2} = 0,25$ (figure 35(b)).

L'étude de l'influence de la température révèle également, sur le plan expérimental, des résultats complexes que les simulations numériques peuvent permettre d'interpréter. En effet, comme les températures de Curie du Fe et du Dy sont très différentes, le Dy, dont le moment magnétique est nettement plus élevé que celui du Fe, verra sa contribution magnétique fortement diminuée lorsque la température va augmenter. Ce phénomène dépendra bien évidemment des épaisseurs des couches du super-réseau, mais aussi de la variation éventuelle de l'anisotropie magnétique du Dy. Afin de

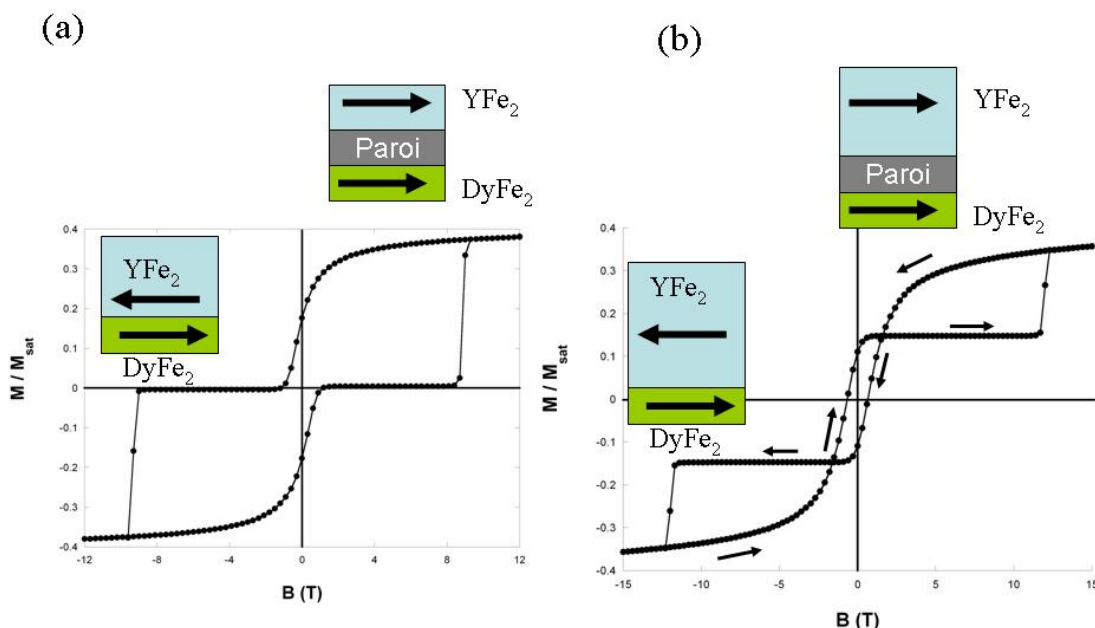


Figure 35. (a) Cycles d'hystérésis simulés suivant la direction x (direction du champ magnétique appliqué) de l'aimantation totale à basse température pour les super-réseaux DyFe_2 (10nm)/ YFe_2 (20nm) et DyFe_2 (5nm)/ YFe_2 (20nm).

déterminer l'évolution des différentes contributions magnétiques lorsque la température augmente, il est donc nécessaire de pouvoir mesurer les aimantations des différentes espèces chimiques. Sur le plan numérique, cela ne pose pas de difficulté particulière, en revanche, c'est beaucoup plus délicat sur le plan expérimental. A titre d'exemple, la figure 36 présente les cycles d'hystérésis mesurés expérimentalement d'un super-réseau DyFe_2 (5nm)/ YFe_2 (20nm) à $T = 200\text{K}$. La figure 36(a) correspond au cycle global tandis que la figure 36(b) est obtenue à partir du signal de dichroïsme circulaire magnétique de rayons X (XMCD) au seuil L_3 de l'Y et du Dy [235]. En champ fort, les moments magnétiques du Fe dans les 2 couches sont antiparallèles, d'où l'existence d'une paroi d'interface. Contrairement au cas des basses températures, cette paroi est localisée dans la couche dure en raison de la plus faible température de Curie du Dy. On observe donc un déplacement de la paroi d'interface de la couche douce vers la couche dure lorsque la température augmente, déplacement qui dépend des épaisseurs de chaque couche.

Le modèle que nous avons élaboré permet une bonne description qualitative du comportement de l'aimantation au cours de son retournement sous l'application d'un champ appliqué pour des super-réseaux $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$ de différentes épaisseurs. Nous souhaiterions par la suite affiner notre modèle afin de décrire de façon plus quantitative les processus de retournement et étudier les mécanismes de dynamique de l'aimantation sous champ appliqué [238] (phénomène de décalage de cycle appelé anisotropie magnétique d'échange ou "*exchange-bias*" [239]). Pour ce faire, il est nécessaire en particulier de tenir compte de l'évolution en fonction de la température

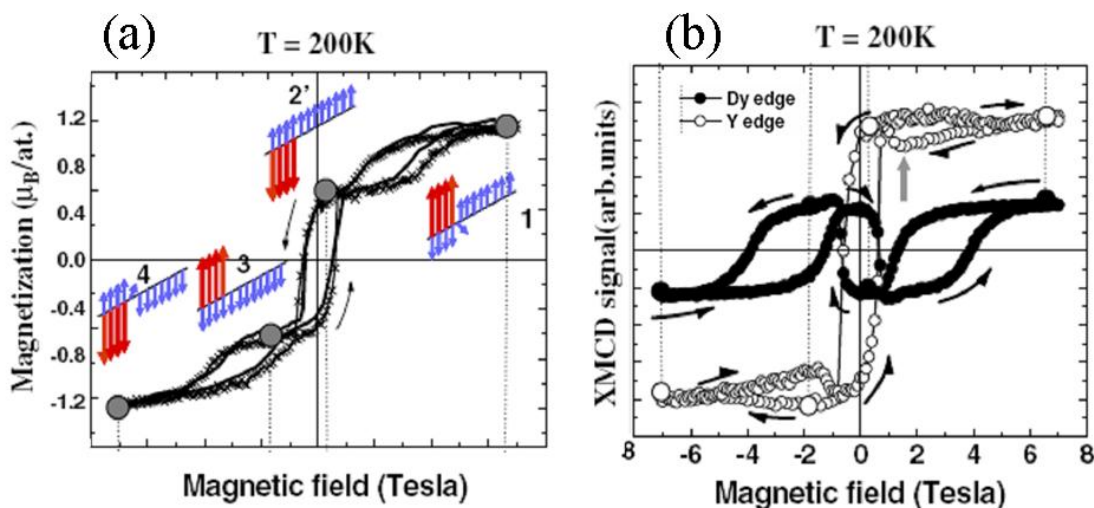


Figure 36. Cycles d'hystérésis expérimentaux à $T = 200\text{K}$ du super-réseau DyFe_2 (5nm)/ YFe_2 (20nm) [235] ((a) aimantation totale ; (b) signal XMCD au seuil L_3 de l'Y et du Dy).

de l'anisotropie magnétique du Dy, à la fois du point de vue de son amplitude mais également de sa direction qui est susceptible de varier ainsi que de la nature chimique des interfaces qui peut modifier radicalement les propriétés magnétiques au cours du retournement de l'aimantation [240]. Par ailleurs, ces super-réseaux peuvent présenter des effets de magnéto-striction dépendants de la température qui devraient être pris en compte car ils peuvent influencer sur l'amplitude des différents termes énergétiques [241].

2.2 Couplage d'échange dans les multicouches $[\text{Pt}/\text{Co}]_n\text{-IrMn}$

Le contexte général dans lequel s'inscrit ce projet de recherche concerne la problématique liée au stockage magnétique de l'information. A l'heure actuelle, les mémoires à accès aléatoire (RAM) qui traitent les données en cours d'utilisation présentent l'inconvénient majeur d'être volatiles. Une des solutions visant à s'affranchir de cette difficulté consiste à utiliser des mémoires magnétiques (MRAM) dont l'élément sensible est une jonction tunnel magnétique composée d'une couche ferromagnétique libre de faible coercivité séparée par une couche non magnétique d'une couche ferromagnétique piégée par couplage d'échange avec une couche antiferromagnétique. Ce dispositif, appelé *vanne de spin*, présente 2 états de résistance différents selon l'orientation de l'aimantation de la couche ferromagnétique libre. L'augmentation de la capacité des MRAM nécessite la réduction de la taille du dispositif et l'étude des effets de taille sur le couplage d'échange ferromagnétique-antiferromagnétique s'avère donc particulièrement important.

L'anisotropie magnétique d'échange typiquement observée lorsqu'un matériau

ferromagnétique est couplé avec un matériau antiferromagnétique fait référence au décalage en champ magnétique du cycle d'hystérésis [239]. Elle est très fortement liée à la nature des interfaces entre le matériau ferromagnétique et le matériau antiferromagnétique [242].

Nous souhaitons modéliser, dans le cadre de ce projet, les propriétés magnétiques de multicouches $[\text{Pt}/\text{Co}]_n\text{-IrMn}$ (figure 37). En effet, des résultats expérimentaux antérieurs ont montré d'une part que l'introduction d'une couche non magnétique (espaceur) de Pt entre la multicouche ferromagnétique $(\text{Pt}/\text{Co})_n$ et la couche antiferromagnétique IrMn (figure 37(b)) augmente fortement le champ d'échange H_E [243-245], d'autre part que le champ d'échange d'une telle multicouche présente un maximum pour une certaine épaisseur des couches de cobalt (de l'ordre de 0,6nm) [244,246].

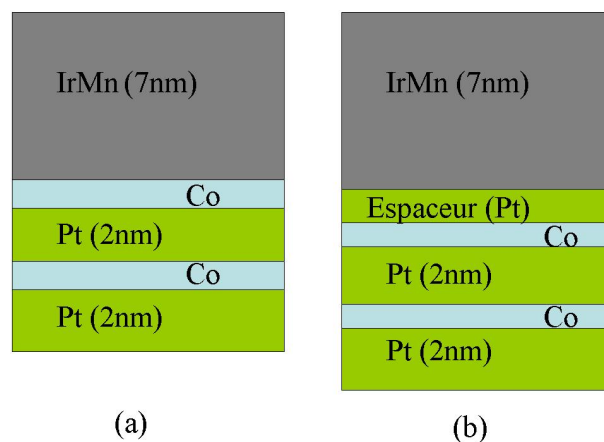


Figure 37. Représentation schématique d'une multicouche IrMn/Co/Pt ((a) sans espaceur ; (b) avec espaceur (couche non magnétique de Pt)).

Par ailleurs, en présence de l'espaceur de Pt, on observe des effets opposés de cet espaceur suivant l'épaisseur des couches de cobalt :

- pour les faibles épaisseurs de cobalt ($< 0,6\text{nm}$), H_E augmente lorsque l'épaisseur de l'espaceur augmente ;
- pour de fortes épaisseurs de cobalt ($> 0,6\text{nm}$), H_E diminue lorsque l'épaisseur de l'espaceur augmente.

Comme l'anisotropie d'échange est un phénomène d'origine interfacial, ces différents résultats sont attribués à la modification de la nature de l'interface de la couche antiferromagnétique IrMn avec la couche située en-dessous suivant que l'on place un espaceur ou non. De plus, l'importance relative de cette interface qui est variable lorsque l'on fait varier l'épaisseur des couches de cobalt joue également un rôle. Cependant, ces résultats demeurent mal compris et des études complémentaires s'avèrent nécessaires. Récemment, des analyses en sonde atomique tomographique réalisées au Groupe de Physique des Matériaux ont permis de déterminer les profils de concentration de

ces multicouches et de préciser la structure des interfaces [247-249]. Dans le cadre de ce projet, nous souhaitons élaborer un modèle de multicouches $[\text{Pt}/\text{Co}]_n\text{-IrMn}$ à l'échelle atomique dans lequel différents types d'interfaces (abruptes, rugueuses, diffuses) pourront être pris en compte. Les résultats de simulation de cycles d'hystérésis pour les différents profils de concentration devraient ainsi permettre de corréler les variations expérimentales du champ d'échange à la nature du profil. Nous pourrions également étudier l'influence de l'espaceur de Pt sur la valeur du champ d'échange en lien avec l'épaisseur des couches de cobalt.

3. Étude d'agrégats ferromagnétiques

Les nanoparticules ou agrégats métalliques font l'objet de nombreuses études depuis une vingtaine d'années, qu'il s'agisse de particules chimiquement pures ou sous forme d'alliages. Leurs propriétés magnétiques, en particulier, suscitent un grand intérêt sur le plan fondamental et appliqué puisque ces nanoparticules constituent des candidats potentiels pour le stockage magnétique haute densité [250]. Du point de vue fondamental, les questions essentielles que l'on se pose concernent la coexistence entre les effets intra- et inter-particules qui vont avoir une influence particulièrement importante sur la dynamique d'aimantation et les mécanismes de retournement de l'aimantation. L'existence éventuelle d'une forte anisotropie magnétique liée aux effets de surface peut permettre d'augmenter la stabilité thermique de l'aimantation et de s'affranchir partiellement des contraintes liées au superparamagnétisme, effet généralement recherché en vue d'applications potentielles.

Dans le cadre de ce projet, nous souhaitons parvenir à une meilleure compréhension des effets des interactions magnétiques sur la dynamique de l'aimantation dans des assemblées de nanoparticules. Pour ce faire, nous nous proposons d'étudier des assemblées d'agrégats de référence $\text{Co}_x\text{-Pt}_{1-x}$ calibrés en masse avec des concentrations variables. Cette étude, envisagée dans le cadre d'une collaboration avec les laboratoires LPMCN de Lyon, Institut Jean Lamour de Nancy et LAMPS de Perpignan devrait permettre d'accéder à des informations issues de différentes techniques complémentaires, à la fois sur le plan expérimental et numérique ou semi-analytique. Nous envisageons en particulier d'étudier, dans le cas d'assemblées de nanoparticules dans des matrices isolantes, la corrélation entre les interactions dipolaires entre particules et les effets de surface et/ou de taille des particules, ainsi que, dans le cas d'un très petit nombre de particules diluées dans des matrices métalliques, les effets additionnels dus aux interactions d'échange indirect (du type RKKY) entre moments magnétiques. L'intérêt de l'utilisation des alliages Co-Pt (ou Fe-Pt) provient de leur très forte anisotropie magnétique lorsqu'ils sont ordonnés dans la phase $L1_0$. Les points sur lesquels nous souhaiterions concentrer notre étude devraient être les suivants :

- les effets de surface (dépendants de la matrice) et l'influence de l'ordre chimique sur le moment magnétique des petites nanoparticules ;

- l'intensité et le type d'anisotropie magnétique de ces nanoparticules, en lien également avec les effets de surface et l'ordre chimique ;
- les effets des interactions magnétiques qui peuvent être importants en raison de l'échange direct dû au recouvrement des orbitales de particules en contact direct et moins importants pour les interactions dipolaires et les interactions d'échange indirect. La nature de ces interactions dépend très fortement de la matrice utilisée (isolante ou conductrice) et de la concentration de l'assemblée de nanoparticules ;
- l'effet de la distribution de volume des nanoparticules ;
- l'influence de la distribution des orientations des axes d'anisotropie (anisotropie aléatoire ou anisotropie texturée).

Pour ce qui concerne l'influence des interactions, des études récentes ont mis en évidence des résultats qui semblent contradictoires, vraisemblablement du fait que différents mécanismes peuvent être à l'oeuvre : tantôt des interactions d'échange direct de forte intensité en raison du fort recouvrement orbital des particules en contact direct, tantôt des interactions dipolaires ou d'échange indirect beaucoup plus faibles. Dans la plupart des études sur les systèmes granulaires, seule l'interaction d'échange direct est prise en compte et les interactions sont par conséquent négligées pour des concentrations inférieures à 10%, c'est-à-dire sous le seuil de percolation. Récemment, il a cependant été montré que pour de petits agrégats, même à de très faibles concentrations et donc pour des distances moyennes entre particules relativement importantes, l'hypothèse superparamagnétique des interactions négligeables n'est pas valable [251]. Les interactions à longue portée (échange indirect ou interactions dipolaires) dominent la réponse magnétique du système et peuvent conduire à un comportement de type verre de spins corrélé au lieu du comportement superparamagnétique attendu.

Ces 20 dernières années, différents modèles ont été proposés pour décrire les effets des interactions dans le cas où celles-ci sont faibles. Ces modèles prévoient parfois des effets opposés sur les barrières d'énergie et par conséquent sur le temps de relaxation [252-255]. Récemment, différents travaux théoriques ou numériques ont été réalisés afin d'apporter une meilleure compréhension aux effets des interactions dans les assemblées d'agrégats. Cependant, l'ensemble de ces travaux traite uniquement le cas des interactions dipolaires parce que la prise en compte des interactions de type RKKY imposerait de tenir compte de chaque moment atomique individuellement ce qui rendrait la tâche considérablement plus ardue. Des calculs semi-analytiques ont été réalisés en utilisant l'approximation usuelle du macrospin afin d'étudier les effets des interactions dipolaires sur l'aimantation à l'équilibre [256,257], les courbes d'aimantation ZFC/FC [258] ou la susceptibilité alternative [259]. Cependant, ces études sont limitées au cas de faibles interactions dipolaires. D'autres travaux ont été réalisés dans le cas d'interactions plus importantes [260] mais avec d'autres approximations qui limitent la portée des résultats obtenus. Enfin, on peut noter que l'ensemble de ces travaux a été réalisé dans le cas d'une anisotropie uniaxiale, ignorant ainsi certains effets intrinsèques sur l'anisotropie liés aux effets de surface.

Bibliographie

- [1] B. Widom (1965), *J. Chem. Phys.* **43**, 3892
- [2] C. Domb, D.L. Hunter (1965), *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1147
- [3] A.Z. Patashinskii, V.L. Prokovskii (1966), *Sov. Phys. JETP* **23**, 292
- [4] M. Henkel (1999), *Conformal invariance and critical phenomena* (Springer Verlag)
- [5] L.P. Kadanoff (1966), *Physics* **2**, 263
- [6] K. Wilson (1971), *Phys. Rev. B* **4**, 3184
- [7] K. Wilson, J.B. Kogut (1974), *Phys. Rep. C* **12**, 75
- [8] M.E. Fischer (1967), *Repr. Prog. Phys.* **30**, 615
- [9] E. Ising (1925), *Z. Phys.* **31**, 253
- [10] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin (1976), *Solid State Physics* (Saunders College Publishing)
- [11] F.Y. Wu (1982), *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235
- [12] M. Bretz (1977), *Phys. Rev. Lett.* **38**, 501
- [13] M.J. Tejwani, O. Ferreira, O.E. Vilches (1980), *Phys. Rev. Lett.* **44**, 152
- [14] F.C. Motteler, J.G. Dash (1985), *Phys. Rev. B* **31**, 346
- [15] H. Wiechert (1991), *Physica* **169B**, 144
- [16] P. Piercy, H. Pfnür (1987), *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1124
- [17] C. Voges, H. Pfnür (1998), *Phys. Rev. B* **57**, 3345
- [18] K. Budde, L. Schwenger, C. Voges, H. Pfnür (1995), *Phys. Rev. B* **52**, 9275
- [19] C. Dasgupta, B.I. Halperin (1981), *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1556
- [20] P. Olsson, S. Teitel (1998), *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1964
- [21] V.L. Berezinskii (1971), *Sov. Phys. JETP* **32**, 493
- [22] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless (1973), *J. Phys. C* **6**, 118
- [23] M. Bander, D.L. Mills (1988), *Phys. Rev. B* **38**, 12015
- [24] S.T. Bramwell, P.C.W. Holdsworth (1993), *J. Phys. Cond. Mat.* **5**, L53
- [25] N. Metropolis, A.E. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller (1953), *J. Chem. Phys.* **21**, 1087
- [26] R.H. Swendsen, J.S. Wang (1987), *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86
- [27] U. Wolff (1989), *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361
- [28] U. Wolff (1989), *Phys. Lett. B* **228**, 379
- [29] W. Janke, S. Kappler (1995), *Phys. Rev. Lett.* **74**, 212
- [30] M.S. Carroll, W. Janke, S. Kappler (1998), *J. Stat. Phys.* **90**, 1277
- [31] B.A. Berg (2000), *Fields Inst. Commun.* **26**, 1
- [32] W. Janke (1998), *Physica* **A254**, 164
- [33] U. Nowak, D. Hinzke (1999) *J. Appl. Phys.* **85**, 4337
- [34] A. Lyberatos, J. Earl, R.W. Chantrell (1996), *Phys. Rev. B* **53**, 5493
- [35] D. Hinzke, U. Nowak (2000), *Phys. Rev. B* **61**, 6734
- [36] D. Hinzke, U. Nowak (2000), *J. Magn. Magn. Mater.* **221**, 365
- [37] K. Binder, D.W. Heermann (1990), *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (2nd Edition, Springer-Verlag, 1990)
- [38] O. Chubykalo, U. Nowak, R. Smirnov-Rueda, M.A. Wongsam, R.W. Chantrell, J.M. Gonzalez (2003), *Phys. Rev. B* **67**, 064422
- [39] U. Nowak, R.W. Chantrell, E.C. Kennedy (2000), *Phys. Rev. Lett.* **84**, 163
- [40] R. Smirnov-Rueda, O. Chubykalo, U. Nowak, R.W. Chantrell, J.M. Gonzalez (2000), *J. Appl. Phys.* **87**, 4798
- [41] J. Cardy (1996), *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1996), chap. 8

- [42] P.W. Mitchell, R.A. Cowley, H. Yoshizawa, P. Böni, Y.J. Uemura, R.J. Birgenau (1986), *Phys. Rev. B* **34**, 4719
- [43] Vik.S. Dotsenko, Vl.S. Dotsenko (1981), *Sov. Phys. JETP Lett.* **33**, 37
- [44] Vik.S. Dotsenko, Vl.S. Dotsenko (1983), *Adv. Phys.* **32**, 129
- [45] B.N. Shalaev (1984), *Sov. Phys. Solid State* **26**, 1811
- [46] B.N. Shalaev (1994), *Phys. Rep.* **237**, 129
- [47] R. Shankar (1987), *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2466
- [48] R. Shankar (1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2390
- [49] A.W.W. Ludwig (1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2388
- [50] A.W.W. Ludwig (1990), *Nucl. Phys. B* **330**, 639
- [51] K. Ziegler (1990), *Nucl. Phys. B* **344**, 499
- [52] M. Picco (1997), *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2998
- [53] J. Cardy, J.J. Jacobsen (1997), *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4063
- [54] J.J. Jacobsen, J. Cardy (1998), *Nucl. Phys. B* **515**, 701
- [55] F.D.A. Aarão Reis, S.L.A. de Queiroz, R.R. dos Santos (1997), *Phys. Rev. B* **56**, 6013
- [56] D. Stauffer, F.D.A. Aarão Reis, S.L.A. de Queiroz, R.R. dos Santos (1997), *Int. J. Mod. Phys. C* **8**, 1209
- [57] S. Chen, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau (1995), *Phys. Rev. E* **52**, 1377
- [58] C. Chatelain, B. Berche (1998), *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1670
- [59] M. Picco (1998), preprint cond-mat/9802092
- [60] V.B. Andreichenko, Vl.S. Dotsenko, W. Selke, J.-S. Wang (1990), *Nucl. Phys. B* **344**, 531
- [61] J.-S. Wang, W. Selke, Vl.S. Dotsenko, V.B. Andreichenko (1990), *Europhys. Lett.* **11**, 301
- [62] J.-S. Wang, W. Selke, Vl.S. Dotsenko, V.B. Andreichenko (1990), *Physica A* **164**, 221
- [63] W. Selke (1993), in: *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics IV*, eds. D.P. Landau, K.K. Mon, and H.-B. Schüttler (Springer, Berlin, 1993), p. 183
- [64] W. Selke (1994), *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3487
- [65] A.L. Talapov, L.N. Shchur (1994), *J. Phys. Condens. Matter* **6**, 8295
- [66] W. Selke, F. Szalma, P. Lajkó, F. Iglói (1997), *J. Stat. Phys.* **89**, 1079
- [67] W. Selke, L.N. Shchur, O.A. Vasilyev (1998), *Physica A* **259**, 388
- [68] A. Roder, J. Adler, W. Janke (1998), *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4697
- [69] A. Roder, J. Adler, W. Janke (1999), *Physica A* **265**, 28
- [70] J.-K. Kim (2000), *Phys. Rev. B* **61**, 1246
- [71] J.-K. Kim, A. Patrascioiu (1994), *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2785
- [72] J.-K. Kim, A. Patrascioiu (1994), *Phys. Rev. B* **49**, 15764
- [73] J.-K. Kim, A. Patrascioiu (1994), *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3489
- [74] W. Selke, L.N. Shchur, A.L. Talapov (1994), in: *Annual Reviews of Computational Physics, Vol. I*, ed. D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 1994), p. 17
- [75] K. Ziegler (1994), *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3488
- [76] H.G. Ballesteros, L.A. Fernandez, V. Martin-Mayor, A. Munoz Sudupe, G. Parisi, J.J. Ruiz-Lorenzo (1997), *J. Phys. A* **30**, 8379
- [77] S. Wiseman, E. Domany (1995), *Phys. Rev. E* **51**, 3074
- [78] S. Wiseman, E. Domany (1995), *Phys. Rev. E* **52**, 3469
- [79] A. Aharony, A. B. Harris (1996), *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3700
- [80] J. Cardy (1999), *Physica A* **263**, 215
- [81] J. Cardy (1999), *J. Phys. A* **32** L177.
- [82] T. Olson, A. P. Young (1999), *Phys. Rev. B* **60**, 3428
- [83] A.B. Harris (1974), *J. Phys. C* **7**, 1671
- [84] Y.S. Shapir, A. Aharony (1981), *J. Phys. C* **14**, L905
- [85] A.B. Harris, T.C. Lubensky (1974), *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1540
- [86] G. Grinstein, A. Luther (1976), *Phys. Rev. B* **13**, 1329
- [87] Y. Imry, S.K. Ma (1975), *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1399

- [88] S. Trimper (1985), *Phys. Lett.* **113A**, 45
- [89] Y. Imry, M. Wortis (1979), *Phys. Rev. B* **19**, 3580
- [90] M. Aizenman, J. Wehr (1989), *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503
- [91] K. Hui, A.N. Berker (1989), *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2507
- [92] A.N. Berker (1991), *J. Appl. Phys.* **70**, 5941
- [93] A.N. Berker (1993), *Physica A* **194**, 72
- [94] B. Berche, P.E. Berche, M. Henkel, F. Iglói, P. Lajkó, S. Morgan, L. Turban (1995), *J. Phys. A* **28**, L165
- [95] P.E. Berche, B. Berche, L. Turban (1996), *J. Physique I (France)* **6**, 621
- [96] P.E. Berche, B. Berche (1997), *Phys. Rev. B* **56**, 5276
- [97] U. Grimm et M. Baake (1996), *The Mathematics of Long-Range Aperiodic Order*, ed. R.V. Moody (Kluwer, Dordrecht, 1996), p. 199
- [98] J.M. Luck (1993), *J. Stat. Phys.* **72**, 417
- [99] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn (1984), *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951
- [100] M. Queffélec (1987), *Substitution Dynamical Systems - Spectral Analysis (Lecture Notes in Mathematics 1294)* ed. A. Dold and B. Eckmann (Berlin: Springer), p.97
- [101] J.M. Dumont (1990), *Number Theory and Physics. Springer Proc. Phys.*, vol. 47, ed. J.M. Luck, P. Moussa and M. Waldschmidt (Berlin: Springer), p.185
- [102] J.M. Luck (1993), *Europhys. Lett.* **24**, 359
- [103] P. Collet, J.P. Eckmann (1980), *Iterated Maps on the Interval as Dynamical Systems* (Boston: Birkhäuser)
- [104] L. Turban, F. Iglói, B. Berche (1994), *Phys. Rev. B* **49**, 12695
- [105] M. Dekking, M. Mendès-France, A. Van der Poorten (1983), *Math. Intelligencer* **4**, 130
- [106] L. Turban, B. Berche (1993), *Z. Phys. B* **92**, 307
- [107] F. Iglói, L. Turban (1994), *Europhys. Lett.* **27 (2)**, 91
- [108] D. Ledue, D.P. Landau, J. Teillet (1997), in *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics*, vol. X, ed. D.P. Landau, K.K. Mon, H.B. Schüttler (Springer, Berlin, 1997)
- [109] P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche (1998), *Phys. Rev. Lett.* **80**, 297
- [110] C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche (1999), *Eur. Phys. J. B* **7**, 439
- [111] R. Fisch (1978), *J. Stat. Phys.* **18**, 111
- [112] W. Kinzel, E. Domany (1981), *Phys. Rev. B* **23**, 3421
- [113] K. Vollmayr, J.D. Reger, M. Scheucher, K. Binder (1993), *Z. Phys. B* **91**, 113
- [114] C. Borgs, W. Janke (1992), *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1738
- [115] W. Janke (1993), *Phys. Rev. B* **47**, 14757
- [116] W. Janke (1994), *Recent Developments in Monte Carlo Simulations of First-Order Phase Transitions*, in: *Computer Simulations in Condensed Matter Physics VII*, eds. D.P. Landau, K.K. Mon, and H.-B. Schüttler (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1994), p. 29
- [117] W. Janke (1996), *Monte Carlo Simulations of Spin Systems*, in: *Computational Physics: Selected Methods – Simple Exercises – Serious Applications*, eds. K.H. Hoffmann and M. Schreiber (Springer, Heidelberg, 1996), p. 10
- [118] W. Janke (1998), *Mathematics and Computers in Simulations* **47**, 329
- [119] R. Folk, Y. Holovatch, T. Yavors'kii (2003), *Physics Uspekhi* **46**, 169 [e-print cond-mat/0106468]
- [120] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi, J.J. Ruiz-Lorenzo (2000), *Phys. Rev. B* **61**, 3215
- [121] C. Chatelain, B. Berche, W. Janke, P.E. Berche (2001), *Phys. Rev. E* **64**, 036120
- [122] C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche, W. Janke (2002), *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* **106&107**, 899
- [123] C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche, W. Janke (2002), *Comp. Phys. Comm.* **147**, 431
- [124] C. Chatelain, B. Berche, W. Janke, P.E. Berche (2005), *Nucl. Phys. B* **719** [FS], 275
- [125] P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke (2002), *Comp. Phys. Comm.* **147**, 427
- [126] P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche, W. Janke (2004), *Eur. Phys. J. B* **38**, 463

- [127] M. Hellmund, W. Janke (2002), *Comp. Phys. Comm.* **147**, 435
- [128] M. Hellmund, W. Janke (2002), *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* **106&107**, 923
- [129] M. Hellmund, W. Janke (2003), *Phys. Rev. E* **67**, 026118
- [130] C.D. Lorenz, R.M. Ziff (1998), *Phys. Rev. E* **57**, 230
- [131] R. Guida, J. Zinn-Justin (1998), *J. Phys. A* **31**, 8103
- [132] D.P. Landau (1980), *Phys. Rev. B* **22**, 2450
- [133] J. Marro, A. Labarta, J. Tejada (1986), *Phys. Rev. B* **34**, 347
- [134] D. Chowdhury, D. Stauffer (1986), *J. Stat. Phys.* **44**, 203
- [135] P. Braun, M. Föhnle (1988), *J. Stat. Phys.* **52**, 775
- [136] J.-S. Wang, D. Chowdhury (1989), *J. Phys. France* **50**, 2905
- [137] J.-S. Wang, M. Wöhlert, H. Mühlenbein, D. Chowdhury (1990), *Physica A* **166**, 173
- [138] T. Holey, M. Föhnle (1990), *Phys. Rev. B* **41**, 11709
- [139] H.-O. Heuer (1990), *Europhys. Lett.* **12**, 551
- [140] H.-O. Heuer (1990), *Phys. Rev. B* **42**, 6476
- [141] H.-O. Heuer (1993), *J. Phys. A* **26**, L333
- [142] M. Hennecke (1993), *Phys. Rev. B* **48**, 6271
- [143] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi, J.J. Ruiz-Lorenzo (1998), *Phys. Rev. B* **58**, 2740
- [144] S. Wiseman, E. Domany (1998), *Phys. Rev. Lett.* **81**, 22
- [145] S. Wiseman, E. Domany (1998), *Phys. Rev. E* **58**, 2938
- [146] P. Calabrese, V. Martín-Mayor, A. Pelissetto, E. Vicari (2003), *Phys. Rev. E* **68**, 036136
- [147] Y. Holovatch, T. Yavors'kii (1998), *J. Stat. Phys.* **92**, 785
- [148] R. Folk, Y. Holovatch, T. Yavors'kii (1998), *J. Phys. Stud. (Ukraine)* **2**, 213
- [149] R. Folk, Y. Holovatch, T. Yavors'kii (1999), *JETP Lett.* **69**, 747
- [150] R. Folk, Y. Holovatch, T. Yavors'kii (2000), *Phys. Rev. B* **61**, 15114
- [151] K.B. Varnashev (2000), *Phys. Rev. B* **61**, 14660
- [152] D.V. Pakhnin, A.I. Sokolov (2000), *Phys. Rev. B* **61**, 15130
- [153] D.V. Pakhnin, A.I. Sokolov (2000), *JETP Lett.* **71**, 412
- [154] A. Pelissetto, E. Vicari (2000), *Phys. Rev. B* **62**, 6393
- [155] P. Calabrese, P. Parrucini, A. Pelissetto, E. Vicari (2004), *Phys. Rev. E* **69**, 036120
- [156] K.E. Newman, E.K. Riedel, *Phys. Rev. B* **25**, 264 (1982).
- [157] J. Jug (1983), *Phys. Rev. B* **27**, 609
- [158] I.O. Mayer (1989), *J. Phys. A* **22**, 2815
- [159] I.O. Mayer, A.I. Sokolov, B.N. Shalaev (1989), *Ferroelectrics* **95**, 93
- [160] C. Bervillier, M. Shpot (1992), *Phys. Rev. B* **46**, 955
- [161] K. Binder, D.P. Landau (1980), *Phys. Rev. B* **21**, 1941
- [162] M. Caselle, M. Hasenbusch (1997), *J. Phys. A* **30**, 4963
- [163] P.E. Berche, B. Berche, C. Chatelain, W. Janke (2005), *Condens. Matter. Phys.* **8**, 47
- [164] M. Dudka, R. Folk, Yu. Holovatch, D. Ivaneyko (2003), *J. Magn. Magn. Mater.* **256**, 243
- [165] B.M. McCoy, T.T. Wu (1968), *Phys. Rev.* **176**, 631
- [166] B.M. McCoy (1969), *Phys. Rev.* **188**, 1014
- [167] A. Weinrib, B.I. Halperin (1983), *Phys. Rev. B* **27**, 413
- [168] H.G. Ballesteros, G. Parisi (1999), *Phys. Rev. B* **60**, 12912
- [169] V.V. Prudnikov, A.A. Fedorenko (1999), *J. Phys. A* **32**, L399
- [170] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, A.A. Fedorenko (1999), *J. Phys. A* **32**, 858
- [171] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, A.A. Fedorenko (2000), *Phys. Rev. B* **62**, 8777
- [172] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, S.V. Dorofeev, V. Yu Kolesnikov (2005), *Condens. Matter. Phys.* **8**, 213
- [173] D. Ivaneyko, B. Berche, Yu. Holovatch, J. Ilnytskyi (2008), *Physica A* **387**, 4497
- [174] H. Meyer-Ortmanns, T. Reisz (1998), *J. Math. Phys.* **39**, 5316
- [175] B. Derrida (1984), *Phys. Rep.* **103**, 29

- [176] M. Lahmrami, C. Dupas, P. Houdy (2004), *Les nanosciences - Nanotechnologie et nanophysique*, Belin
- [177] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuset, A. Friederich, J. Chazelas (1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472
- [178] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn (1989), *Phys. Rev. B* **39**, 4828
- [179] C. Kittel (1946), *Phys. Rev.* **70**, 965
- [180] O. Fruchart, B. Kevorkian, J.-C. Toussaint (2001), *Phys. Rev. B* **63**, 174418
- [181] W. Wernsdorfer, B. Doudin, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoit, J. Meier, J.-Ph. Ansermet, B. Barbara (1996), *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1873
- [182] C. Kittel (1949), *Rev. Mod. Phys.* **21**, 541
- [183] C.B. Bean, J.D. Livingston (1959), *J. Appl. Phys.* **30**, 120S
- [184] A. Tasaki, S. Tomiyana, S. Iida (1965), *J. Appl. Phys.* **4**, 707
- [185] C. Hayashi (1987), *J. Vac. Sci. Technol.* **A5**, 1375
- [186] A. Aharoni (2000), *Introduction to the theory of ferromagnetism*, Oxford University Press, London
- [187] A.H. Morrish (1965), *The physical principles of magnetism*, Wiley, New York
- [188] W. Wernsdorfer, E. Bonet Orozco, K. Hasselbach, A. Benoit, B. Barbara, N. Demoncy, A. Loiseau, H. Pascard, D. Mailly (1997), *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1791
- [189] W. Wernsdorfer, E. Bonet Orozco, K. Hasselbach, A. Benoit, D. Mailly, O. Kubo, H. Nakano, B. Barbara (1997), *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4014
- [190] M. Jamet, W. Wernsdorfer, C. Thirion, D. Mailly, V. Dupuis, P. Mélinon, and A. Pérez (2001), *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4676
- [191] W. Wernsdorfer (2001), *Adv. Chem. Phys.* **118**, 99
- [192] L. Néel (1949), *Ann. Geophys.* **5**, 99
- [193] W.F. Brown (1963), *Phys. Rev.* **130**, 1677
- [194] D. García-Pablos, P. García-Mochales, N. García, P.A. Serena (1997), *J. Appl. Phys.* **79**, 6019
- [195] H.L. Richards, M.A. Novotny, P.A. Rikvold (1996), *Phys. Rev. B* **54**, 4113
- [196] H.L. Richards, M. Kolesik, P.-A. Lindgård, P.A. Rikvold, M. A. Novotny (1997), *Phys. Rev. B* **55**, 11521
- [197] D. Hinzke, U. Nowak (1998), *Phys. Rev. B* **58**, 265
- [198] D. Hinzke, U. Nowak (1999), *Comp. Phys. Com.* **121&122**, 334
- [199] J. Kurkijärvi (1972), *Phys. Rev. B* **6**, 832
- [200] A. Garg (1995), *Phys. Rev. B* **51**, 15592
- [201] E.C. Stoner and E.P. Wohlfarth (1948), *Phil. Trans. R. Soc. London A* **240**, 599
- [202] R.H. Victora (1989), *Phys. Rev. Lett.* **63**, 457
- [203] H. Pfeiffer (1990), *Phys. Status Solidi* **A118**, 295
- [204] I. Klik, L. Gunther (1990), *J. Stat. Phys.* **60**, 473
- [205] P. Hänggi, P. Talkner, M. Borkovec (1990), *Rev. Mod. Phys.* **62**, 250
- [206] A. Aharoni (1988), *J. Appl. Phys.* **63**, 5879
- [207] D. Ledue, P.E. Berche, R. Patte (2004), *J. Magn. Magn. Mater.* **272-276**, 683
- [208] D. Ledue, P.E. Berche, R. Patte (2004), *Physica B* **348**, 410
- [209] N. Sato (1986), *J. Appl. Phys.* **59**, 2514
- [210] O. Schulte, F. Klose and W. Felsch (1995), *Phys. Rev. B* **52**, 6480
- [211] D. Mergel, H. Heitmann and P. Hansen (1993), *Phys. Rev. B* **47**, 882
- [212] H. Fujiwara, X. Y. Yu, S. Tsunashima, S. Iwata, M. Sakurai and K. Suzuki (1996), *J. Appl. Phys.* **79**, 6270
- [213] Z. S. Shan, D. J. Sellmyer, S. S. Jaswal, Y. J. Wang and J. X. Shen (1990), *Phys. Rev. B* **42**, 10446
- [214] A. Tamion, E. Cadel, C. Bordel and D. Blavette (2006), *Scripta Mater.* **54**, 671
- [215] A. Tamion, F. Ott, P. E. Berche, E. Talbot, C. Bordel and D. Blavette (2008), *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 2650
- [216] N. Heiman, K. Lee, R. I. Potter and S. Kirkpatrick (1976), *J. Appl. Phys.* **47** 2634

- [217] Y. Mimura, N. Imamura, T. Kobayashi, A. Okada and Y. Kushiro (1978), *J. Appl. Phys.* **49**, 1208.
- [218] P. Hansen, S. Klahn, C. Clausen, G. Much and K. Witter (1991), *J. Appl. Phys.* **69**, 3194
- [219] S. Kobe and K. Handrich (1976), *Phys. Stat. Sol. (b)* **73**, K65
- [220] J. Tappert, W. Keune, R. A. Brand, P. Vulliet, J.-P. Sanchez and T. Shinjo (1996), *J. Appl. Phys.* **80**, 4503
- [221] E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue, R. Patte (2007), *J. Magn. Magn. Mater.* **316**, 281
- [222] E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue (2008), *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, 2814
- [223] J. M. D. Coey, J. Chappert, J. P. Rebouillat and T. S. Wang (1976), *Phys. Rev. Lett.* **36**, 1061
- [224] B. X. Gu, H. R. Zhai and B. G. Shen (1990), *Phys. Rev. B* **42**, 10648
- [225] S. Ishio, N. Obara, S. Nagami, T. Miyazaki, T. Kanamori, H. Tange and M. Goto (1993), *J. Magn. Magn. Mater.* **119**, 271
- [226] E. Talbot, D. Ledue, P.E. Berche (2009), *J. Appl. Phys.* **106**, 023901
- [227] J. M. L. Beaujour, S.N. Gordeev, G. J. Bowden, P. A. J. de Groot, B. D. Rainford, R. C. C. Ward, M. R. Wells (2001), *Appl. Phys. Lett.* **78**, 964
- [228] M. Sawicki, G. J. Bowden, P. A. J. de Groot, B. D. Rainford, J.-M. L. Beaujour, R. C. C. Ward, M. R. Wells (2000), *Phys. Rev. B* **62**, 5817
- [229] G. J. Bowden, D. St. P. Bunbury, A. P. Guimares, R. E. Snyder (1968), *J. Phys. C: Solid State Phys.* **1**, 1376
- [230] M. Sawicki, G. J. Bowden, P. A. J. de Groot, B. D. Rainford, R. C. C. Ward, M. R. Wells (2000), *J. Appl. Phys.* **87**, 6839
- [231] Trémolet de Lacheisserie (sous la direction de) (2005), *Magnétisme. II - Matériaux et Applications* (Presses Universitaires de Grenoble)
- [232] K. Dumesnil, M. Dutheil, C. Dufour, P. Mangin (2000), *Phys. Rev. B* **62**, 1136
- [233] J. M. L. Beaujour, G. J. Bowden, S. Gordeev, P. A. J. de Groot, B. D. Rainford, M. Sawicki, R. C. C. Ward, M. R. Wells (2001), *J. Magn. Magn. Mater.* **226**, 1714
- [234] K. Dumesnil, C. Dufour, P. Mangin, A. Rogalev (2002), *Phys. Rev. B* **65**, 094401
- [235] K. Dumesnil, C. Dufour, P. Mangin, A. Rogalev, F. Wilhelm (2005), *J. Phys: Condens. Matter* **17**, L215
- [236] M. R. Fitzsimmons, S. Park, K. Dumesnil, C. Dufour, R. Pynn, J. A. Borchers, J. J. Rhyne, P. Mangin (2006), *Phys. Rev. B* **73**, 134413
- [237] G. J. Bowden, J. M. L. Beaujour, A. A. Zhukov, B. D. Rainford, P. A. J. de Groot, R. C. C. Ward, M. R. Wells (2003), *J. Appl. Phys.* **93**, 6480
- [238] M. R. Fitzsimmons, C. Dufour, K. Dumesnil, J. Dou, M. Pechan (2009), *Phys. Rev. B* **79**, 144425
- [239] W. H. Meiklejohn, C.P. Bean (1956), *Phys. Rev.* **102**, 1413
- [240] G. J. Bowden, K.N. Martin, A. Fox, B. D. Rainford, R. C. C. Ward, P. A. J. de Groot (2008), *J. Phys: Condens. Matter* **20**, 125223
- [241] A.E. Clark (1980), *Ferromagnetic Materials, Vol. 1*, (6th Edition, North-Holland, Amsterdam), p. 549
- [242] J. Nogués, I.K. Schuller (1999), *J. Magn. Magn. Mater.* **192**, 203
- [243] F. Garcia, J. Sort, B. Rodmacq, S. Auffret, B. Dieny (2003), *Appl. Phys. Lett.* **83**, 3537
- [244] J. Sort, V. Baltz, F. Garcia, B. Rodmacq, B. Dieny (2005), *Phys. Rev. B* **71**, 054411
- [245] S. van Dijken, J. Moritz, J.M.D. Coey (2005), *J. Appl. Phys.* **97**, 063907
- [246] V. Baltz (2005), *Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, Grenoble 1*
- [247] L. Lechevallier, A. Zarefy, R. Lardé, H. Chiron, J.-M. Le Breton, V. Baltz, B. Rodmacq, B. Diény (2009), *Phys. Rev. B* **79**, 174434
- [248] A. Zarefy, R. Lardé, L. Lechevallier, F. Cuvilly, J.-M. Le Breton, V. Baltz, B. Rodmacq, B. Diény (2009), *J. Appl. Phys.* **105**, 103912
- [249] R. Lardé, L. Lechevallier, A. Zarefy, A. Bostel, J. Juraszek, J.-M. Le Breton, B. Rodmacq, B. Diény (2009), *J. Appl. Phys.* **105**, 084307
- [250] S. Sun, C. B. Murray, D. Weller, L. Folks, A. Moser (2000), *Science* **287**, 1989

- [251] M. Hillemkamp, G. Di Domenicantonio, C. Flix (2008), *Phys. Rev. B* **77**, 014422
- [252] M.F. Hansen, S. Morup (1998), *J. Magn. Magn. Mater.* **184**, L262
- [253] S. Morup, E. Tronc (1994), *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3278
- [254] J.L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc (1999), *J. Magn. Magn. Mater.* **202**, 251
- [255] F. Luis, F. Petroff, J. Bartolomé (2004), *J. Phys: Condens. Matter* **16**, 5109
- [256] P.E. Jönsson, J.L. García-Palacios (2001), *Phys. Rev. B* **64**, 174416
- [257] H. Kachkachi, M. Azeggagh (2005), *Eur. Phys. J. B* **44**, 299
- [258] M. Azeggagh, H. Kachkachi (2007), *Phys. Rev. B* **75**, 174410
- [259] J.-O. Andersson, C. Djurberg, T. Jonsson, P. Svedlindh, P. Nordblad (1997), *Phys. Rev. B* **56**, 13983
- [260] D.V. Berkov, N.L. Gorn (2001), *J. Phys. Cond. Matter.* **13**, 9369

Liste des travaux

Liste de publications

Revue Internationale avec Comité de Lecture

[1] “Surface magnetization of aperiodic Ising systems: a comparative study of the bond and site problems.”

L. Turban, **P.E. Berche** and B. Berche

Journal of Physics A: Mathematics and General **27** (1994) 6349-6366

<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9408077>

[2] “Anisotropic scaling in layered aperiodic Ising systems.”

B. Berche, **P.E. Berche**, M. Henkel, F. Iglói, P. Lajkó, S. Morgan and L. Turban

Journal of Physics A: Mathematics and General **28** (1995) L165-171

<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9501059>

[3] “Marginal anisotropy in layered aperiodic Ising systems.”

P.E. Berche, B. Berche and L. Turban

Journal de Physique I (France) **6** (1996) 621-640

<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9602037>

[4] “Aperiodic spin chain in the mean-field approximation.”

P.E. Berche and B. Berche

Journal of Physics A: Mathematics and General **30** (1997) 1347-1362

<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9611067>

[5] “Cross-over between aperiodic and homogeneous semi-infinite fixed point in multilayered Ising systems.”

P.E. Berche and B. Berche

Physical Review B **56** (1997) 5276-5285

<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9705082>

[6] “Aperiodicity-induced second order phase transition in the 8-state Potts model.”

P.E. Berche, C. Chatelain and B. Berche

Physical Review Letters **80** (1998) 297-300

<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9711205>

[7] “The McCoy-Wu model in the mean-field approximation.”

B. Berche, **P.E. Berche**, F. Iglói and G. Palágyi

Journal of Physics A: Mathematics and General **31** (1998) 5193-5202

<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9804132>

[8] “Second-order phase transition induced by deterministic fluctuations in aperiodic 8-state Potts model.”

C. Chatelain, **P.E. Berche** and B. Berche

European Physical Journal B **7** (1999) 439-449

<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/9809386>

[9] “Influence of deterministic fluctuations on the 8-state Potts model.”

C. Chatelain, **P.E. Berche** and B. Berche

Computer Physics Communications **121-122** (1999) 197-198

- [10] “Evidence for softening of first-order transition in 3D by quenched disorder.”
C. Chatelain, B. Berche, W. Janke and **P.E. Berche**
Physical Review E **64** (2001) 036120-036124
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0103377>
- [11] “Crossover effects in the bond-diluted Ising model in three dimensions.”
P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke
Computer Physics Communications **147** (2002) 427-430
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0202177>
- [12] “Influence of dilution on the strong first-order phase transition of the 3D 4-state Potts model.”
C. Chatelain, **P.E. Berche**, B. Berche and W. Janke
Computer Physics Communications **147** (2002) 431-434
- [13] “Magnetization switching in a ferromagnetic Heisenberg nanoparticle with uniaxial anisotropy: A Monte Carlo investigation.”
D. Ledue, **P.E. Berche** and R. Patte
Physica B **348** (2004) 410-419
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0312536>
- [14] “Bond dilution in the 3D Ising model.”
P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke
European Physical Journal B **38** (2004) 463-474
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0402596>
- [15] “Random Ising model in 3D: theory, experiment and simulation, a difficult coexistence.”
B. Berche, **P.E. Berche**, C. Chatelain and W. Janke
Condensed Matter Physics **8** (2005) 47-58
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0411255>
- [16] “Monte Carlo study of Phase transitions in the bond-diluted 3D 4-state Potts model.”
C. Chatelain, B. Berche, W. Janke and **P.E. Berche**
Nuclear Physics B **719** [FS] (2005) 275-311
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0501115>
- [17] “Magnetic properties of Fe/Dy multilayers: A Monte Carlo investigation.”
E. Talbot, **P.E. Berche**, D. Ledue and R. Patte
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **316** (2007) 281-284
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0607437>
- [18] “A study of the magnetization profile of (Fe/Dy) multilayers.”
A. Tamion, F. Ott, **P.E. Berche**, E. Talbot, C. Bordel and D. Blavette
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **320** (2008) 2650-2659
- [19] “Monte Carlo investigation of the magnetic anisotropy in Fe/Dy multilayers.”
E. Talbot, **P.E. Berche** and D. Ledue
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **320** (2008) 2814-2822
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0807.1262>
- [20] “Magnetization reversal in amorphous Fe/Dy multilayers: a Monte Carlo study.”
E. Talbot, D. Ledue and **P.E. Berche**
Journal of Applied Physics **106** (2009) 023901-023911

Actes de Congrès Internationaux

- [1] “3D bond-diluted 4-state Potts model: a Monte Carlo study.”
C. Chatelain, **P.E. Berche**, B. Berche and W. Janke
Nuclear Physics B **106&107** (2002) 899-901
- [2] “Monte Carlo studies of three-dimensional bond-diluted ferromagnets.”
P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke
In: *High Performance Computing in Science and Engineering*, edited by S. Wagner, W. Hanke, A. Bode and F. Durst (Springer, Berlin, 2003), 227-238
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0212504>
- [3] “Monte Carlo study of the thermally activated magnetisation reversal in a single nanoparticle.”
D. Ledue, **P.E. Berche** and R. Patte
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **272-276** (2004) 683-684
- [4] “Phase transitions in disordered ferromagnets.”
W. Janke, **P.E. Berche**, C. Chatelain and B. Berche
Proceedings of NIC-Symposium 2004 (John von Neumann Institut for Computing - Jülich), eds. D. Wolf, G. Münster, and M. Kremer (NIC Series, Vol. **20**, Jülich, 2004), pp 241-250
- [5] “Quenched disorder distributions in three-dimensional diluted ferromagnets.”
W. Janke, **P.E. Berche**, C. Chatelain and B. Berche
Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XVI, eds. D.P. Landau, S.P. Lewis, and H.-B. Schüttler (Springer, Berlin, 2004), pp 89-94
<http://xxx.lanl.gov/archive/cond-mat/0304642>
- [6] “Quenched disordered ferromagnets.”
W. Janke, B. Berche, C. Chatelain, **P.E. Berche** and M. Hellmund
Proceedings of the XXIIIrd International Symposium on Lattice Field Theory, 23-30 July 2005, Trinity College, Dublin
http://pos.sissa.it/archive/conferences/020/018/LAT2005_018.pdf

Communications dans des Congrès

Communications orales

- [1] *Anisotropie marginale dans la chaîne d’Ising quantique.*
P.E. Berche, L. Turban et B. Berche
Communication orale aux 16^{èmes} Rencontres de Physique Statistique de Paris ESPCI, (25/26-01-1996)
- [2] *Multicouches apériodiques dans le modèle d’Ising bidimensionnel.*
P.E. Berche et B. Berche
Communication orale aux 17^{èmes} Rencontres de Physique Statistique de Paris ESPCI, (30/31-01-1997)
- [3] *A Monte Carlo study of bond dilution in the Ising and Potts models in 3D*
P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke
CompPhys01 - 2nd Workshop on Computational Physics
Leipzig (13-12-2001)

[4] *Monte Carlo study of the thermal activated magnetization reversal in a ferromagnetic nanoparticle.*

P.E. Berche and D. Ledue

CompPhys02 - 3rd Workshop on Computational Physics

Leipzig (10-12-2002)

[5] *Propriétés magnétiques de trisouches Fe/Dy/Fe : simulations numériques confrontées à l'expérience.*

P.E. Berche, A. Tamion et C. Bordel

Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre

Jussieu, Paris (24/25-05-2004)

[6] *Time-step quantified Monte Carlo simulation of ZFC-FC magnetization curves for an assembly of nanoparticles.*

P.E. Berche and D. Ledue

European Workshop on Dynamics of Nanomagnets

Versailles (18/19-04-2005)

[7] *Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux DyFe₂/YFe₂ en simulation numérique Monte Carlo.*

T. Philippe, E. Talbot, P.E. Berche

Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre

Jussieu, Paris (5/6-06-2008)

[8] *Investigation of the magnetization reversal in DyFe₂/YFe₂ exchange-coupled superlattices by Monte Carlo simulation*

P.E. Berche, T. Philippe, E. Talbot, C. Dufour

Joint European Magnetic Symposia

Dublin (14/19-09-2008)

[9] *Retournement de l'aimantation dans des super-réseaux DyFe₂/YFe₂ couplés antiferromagnétiquement*

P.E. Berche, E. Talbot, T. Philippe, C. Dufour, K. Dumesnil

GDR Nanoalliages

Lyon (19/20-01-2009)

Communications sous forme d'affiches

[1] *Ségrégation superficielle : cas de l'alliage platine-rhodium.*

P.E. Berche, J. Eugène, S. Ouannasser et H. Dreyssé

Journées Surfaces et Interfaces

Nancy, (27/28-01-1994)

[2] *Scaling anisotrope dans les chaînes d'Ising apériodiques.*

P.E. Berche

Physique en Herbe 95

Nice, (03/07-07-1995)

[3] *Scaling anisotrope dans les chaînes d'Ising apériodiques.*

P.E. Berche, L. Turban et B. Berche

Congrès général de la Société Française de Physique

Marseille, (04/08-09-1995)

[4] *Marginal anisotropy in layered aperiodic Ising systems.*

P.E. Berche, L. Turban and B. Berche

MECO 21 : "Middle European Cooperation in Statistical Physics"

Bled (Slovénie), (18/20-04-1996)

- [5] *Marginal aperiodic perturbation in the mean-field approximation.*
P.E. Berche and B. Berche
 MECO 22 : “Middle European Cooperation in Statistical Physics”
 Szklarska Poreba (Pologne), (03/05-04-1997)
- [6] *Cross-over between aperiodic and homogeneous semi-infinite critical behaviors in multilayered two-dimensional Ising models.*
B. Berche and P.E. Berche
 MECO 22 : “Middle European Cooperation in Statistical Physics”
 Szklarska Poreba (Pologne), (03/05-04-1997)
- [7] *Etude comparative de l'influence de perturbations apériodique et désordonnée sur le comportement critique dans l'approximation de champ moyen.*
B. Berche, P.E. Berche, Ferenc Iglói et Gabor Palàgyi
 Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre
 Jussieu, Paris, (05/06-06-1997)
- [8] *Influence of aperiodic perturbations on the critical behaviour of the Potts model for $q = 3, 4$.*
P.E. Berche and W. Janke
 STATPHYS 20, IUPAP International Conference on Statistical Physics
 Paris, (20/25-07-1998)
- [9] *Second-order phase transitions induced by aperiodic or random fluctuations in the 8-state Potts model*
B. Berche, C. Chatelain and P.E. Berche
 STATPHYS 20, IUPAP International Conference on Statistical Physics
 Paris, (20/25-07-1998)
- [10] *The McCoy-Wu model in the mean-field approximation.*
 G. Palàgyi, F. Iglói, B. Berche and P.E. Berche
 STATPHYS 20, IUPAP International Conference on Statistical Physics
 Paris, (20/25-07-1998)
- [11] *Critical behaviour of the 2d Potts model perturbed by aperiodic sequences.*
P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke
 MECO 24 : “Middle European Cooperation in Statistical Physics”
 Wittenberg (Allemagne), (08/10-03-1999)
- [12] *Etude par simulations Monte Carlo du comportement critique du modèle de Potts perturbé par des séquences apériodiques.*
P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche et W. Janke
 Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre
 Jussieu, Paris, (08/09-06-1999)
- [13] *Influence of non-magnetic impurities on the critical properties of the 3D Ising model.*
P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke
 MECO 25 : “Middle European Cooperation in Statistical Physics”
 Nancy, (09/11-03-2000)
- [14] *Propriétés critiques du modèle d'Ising tridimensionnel en présence d'impuretés non magnétiques.*
P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche et W. Janke
 Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre
 Jussieu, Paris, (05/07-06-2000)
- [15] *Diagramme de phase et comportement critique du modèle de Potts tridimensionnel dilué.*
C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche et W. Janke
 Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre
 Jussieu, Paris, (05/07-06-2000)

[16] *Bond dilution in the 3D Ising model.*

P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke

MECO 26 : “Middle European Cooperation in Statistical Physics”

Prague, (08/10-03-2001)

[17] *Critical properties of the 2D and 3D diluted Potts model.*

C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche, W. Janke and L. Shchur

MECO 26 : “Middle European Cooperation in Statistical Physics”

Prague, (08/10-03-2001)

[18] *Modèles de Potts et d'Ising dilués à trois dimensions.*

P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche et W. Janke

Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre

Jussieu, Paris, (31-05/01-06-2001)

[19] *Propriétés magnétiques sous champ d'une nanoparticule isolée : étude par simulations Monte Carlo.*

D. Ledue et P.E. Berche

Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre

Jussieu, Paris, (31-05/01-06-2001)

[20] *Critical properties of the bond-diluted Ising model in three dimensions.*

P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche and W. Janke

CCP 2001: Europhysics Conference on Computational Physics

Aachen (Allemagne), (05/08-09-2001)

[21] *Influence of dilution on the strong first-order phase transition of the 3D 4-state Potts model.*

C. Chatelain, P.E. Berche, B. Berche and W. Janke

CCP 2001: Europhysics Conference on Computational Physics

Aachen (Allemagne), (05/08-09-2001)

[22] *Monte Carlo study of the magnetization reversal of a single nanoparticle.*

P.E. Berche and D. Ledue

MECO 27 : “Middle European Cooperation in Statistical Physics”

Sopron (Hongrie), (06/09-03-2002)

[23] *Transitions de phase dans les systèmes désordonnés.*

P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche et W. Janke

Congrès Général de la Société Française de Physique

Lyon, (07/10-07-2003)

[24] *Simulations numériques des propriétés magnétiques de trilocales Fe/Dy/Fe.*

P.E. Berche et E. Talbot

9^{ème} Colloque Louis Néel - *Couches minces et nanostructures magnétiques*

Autrans, (17/19-03-2004)

[25] *Propriétés magnétiques de trilocales Fe/Dy/Fe : simulations numériques confrontées à l'expérience.*

E. Talbot, A. Tamion, P.E. Berche et C. Bordel

9^{èmes} Journées de la Matière Condensée (*Société Française de Physique*)

Nancy, (30-08/03-09-2004)

[26] *Transitions de phase dans le modèle de Potts 3D dilué à 4 états.*

P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche et W. Janke

Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre

Jussieu, Paris, (02/03-06-2005)

- [27] *Etude des propriétés magnétiques de multicouches Fe/Dy par simulation Monte Carlo.*
 E. Talbot, P.E. Berche et R. Patte
 Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre
 Jussieu, Paris, (02/03-06-2005)
- [28] *Influence des interactions dipolaires et de la diffusion atomique sur les propriétés d'aimantation dans les multicouches Fe/Dy : étude par simulations Monte Carlo.*
 E. Talbot, P.E. Berche et R. Patte
 10^{ème} Colloque Louis Néel - Couches minces et nanostructures magnétiques
 Dourdan, (21/23-09-2005)
- [29] *Origine de l'anisotropie magnétique dans les multicouches Fe/Dy.*
 E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue et R. Patte
 Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre
 Jussieu, Paris, (01/02-06-2006)
- [30] *Etude de l'anisotropie magnétique perpendiculaire dans les multicouches Fe/Dy : simulation numérique de cycles d'hystérésis.*
 E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue et R. Patte
 11^{ème} Colloque Louis Néel - Couches minces et nanostructures magnétiques
 Lyon, (14/16-03-2007)
- [31] *Transitions de phase dans les systèmes tridimensionnels désordonnés.*
 P.E. Berche, C. Chatelain, B. Berche et W. Janke
 Congrès général de la Société Française de Physique
 Grenoble, (09/13-07-2007)
- [32] *Field dependence of the magnetization depth profile in DyFe₂/YFe₂ superlattices from Monte Carlo simulations.*
 P.E. Berche, E. Talbot, T. Philippe and C. Dufour
 Conference on Computational Physics
 Bruxelles, (05/08-09-2007)

Séminaires

- [1] *Les effets de taille finie dans les transitions de phase du second ordre.*
 "Cours du soir de Physique" (Séminaires de physique générale organisés à l'Université Henri Poincaré, Nancy 1)
 Université Henri Poincaré, Nancy 1 (21-03-1996)
- [2] *Phénomènes critiques dans le modèle d'Ising perturbé par des séquences aperiodiques marginales de volume.*
 Université de Metz (13-11-1996)
- [3] *Influence des fluctuations aperiodiques sur les transitions de phase.*
 Université de Cergy-Pontoise (20-11-1997)
- [4] *Influence of aperiodic perturbations on the phase transitions.*
 Institut für Physik, Universität Mainz (17-02-1998)
- [5] *Influence des fluctuations aperiodiques sur les transitions de phase du premier et second ordres.*
 Université de Rouen (07-05-1998)
- [6] *Influence of aperiodic perturbations on the phase transitions: from periodic to disordered systems*
 Institut für Theoretische Physik, Universität Leipzig (26-05-1998)
- [7] *Phénomènes critiques dans les systèmes perturbés par des fluctuations aperiodiques et aléatoires.*
 Université de Marseille 1 (01-06-1998)

- [8] *Physique statistique et transitions de phase magnétiques.*
Université de Rouen (31-03-2000)
- [9] *Influence of non-magnetic impurities on the critical properties of the 3D Ising and Potts models.*
Institut für Theoretische Physik, Universität Leipzig (04-07-2000)
- [10] *Retournement thermique de l'aimantation d'une nanoparticule.*
(avec D. Ledue)
Université de Rouen (22-03-2002)
- [11] *Transitions de phase dans les systèmes désordonnés.*
Université de Rouen (21-02-2003)
- [12] *Analyse dimensionnelle et lois d'échelle dans les sciences naturelles.*
Université de Rouen (25-03-2005)
- [13] *Simulations numériques Monte Carlo et modélisation des systèmes magnétiques.*
(avec E. Talbot)
Université Claude Bernard, Lyon 1 (09-02-2007)

Activités d'enseignement

J'ai été nommé maître de conférence à l'université de Rouen en septembre 1998. Auparavant, j'avais été moniteur en parallèle avec mon contrat d'allocataire de recherche de 1994 à 1997. Au total, j'enseigne donc depuis une quinzaine d'années et j'ai eu l'occasion au cours de cette période d'intervenir en tant qu'enseignant dans de nombreuses filières ou types de formations : école d'ingénieurs de génie chimique de Nancy (ENSIC), antenne de l'université de Nancy 1 délocalisée à Bar-le-Duc , différentes filières depuis que je suis en poste à Rouen. J'ai enseigné des cours, travaux dirigés et travaux pratiques en DEUG B (devenu Licence Sciences de la Vie et de la Terre), en DEUG STPI (devenu Licence Electronique, Electrotechnique, Automatismes), en DEUG Sciences de la Matière (devenu Licence Mécanique, Physique, Matériaux), en Maîtrise de Sciences physiques, en Master 1 Physique, Matériaux, Sciences de l'Ingénieur, en préparation à l'agrégation de sciences physiques. Ces enseignements concernaient au départ tous les aspects de la physique classique (mécanique, optique, électromagnétisme) mais je m'oriente plutôt, ces dernières années, vers des enseignements de physique plus récente (mécanique quantique, physique atomique, physique statistique, relativité) en L3, M1 ou préparation à l'agrégation. Compte tenu de mon expérience d'enseignement dans les filières de biologie, j'ai conçu un enseignement optionnel (cours et travaux dirigés) intitulé "Apports de la physique à la description de systèmes biologiques" qui s'appuie sur des arguments de lois d'échelle et insiste sur les proximités de raisonnement en physique et en biologie. Malheureusement, cet enseignement n'a pu ouvrir que deux années en dépit de l'approche originale qu'il proposait.

Diffusion de la culture scientifique

Étant membre de la Société Française de Physique depuis 1995, je suis naturellement intéressé par les questions de diffusion de la culture scientifique. Ainsi, je participe tous les ans aux animations dans le cadre de la Fête de la Science, je donne ponctuellement des conférences lors des Journées Portes Ouvertes de l'université à destination des élèves de Terminales ou lors des Conférences *30 minutes pour comprendre* organisées à l'université pour les personnels et étudiants.

De façon plus concrète, j'ai travaillé à partir de l'opération *2005 : année mondiale de la physique* à la mise en place d'un partenariat pérenne entre l'université de Rouen et les collèges et lycées de l'académie, opération dont je suis responsable pour ce qui concerne les relations avec le secondaire. Nous avons ainsi équipé 3 salles de sciences sur le site de l'université qui permettent d'accueillir des classes de collèges et de lycées (mais également de cycle 3 d'écoles élémentaires). Nous proposons des ateliers scientifiques au cours desquels les élèves peuvent manipuler (optique, magnétisme, mécanique des fluides) couplées à des visites de laboratoire et d'expériences spectaculaires (lévitation d'un supraconducteur, observations en microscopie électronique à balayage) ainsi qu'à des conférences sur des thèmes comme l'infiniment grand et l'infiniment petit, le stockage de l'information, les disques durs et la magnéto-résistance géante, le grand collisionneur de hadrons (LHC) etc ... Une présentation des différentes activités que nous proposons pour l'accueil des classes peut être consultée à l'adresse suivante : <http://salledessciences.crihan.fr/>

Depuis cette année (2008-2009), nous avons également mis en place une opération de parrainage entre des collègues enseignants-chercheurs en physique et des classes de lycée de l'académie de Rouen et leur professeur de physique-chimie afin de faire découvrir aux élèves les différents aspects du métier de chercheur tout au long de l'année scolaire (élaboration d'un projet de recherche, expériences, modélisation, exploitation des résultats et confrontation aux hypothèses initiales, communication des résultats ...). Cette activité qui doit permettre au chercheur d'aller dans le lycée et aux élèves de se déplacer à l'université doit également être l'occasion pour les élèves de découvrir les métiers de la recherche, les possibilités offertes par les études scientifiques etc ... Au cours de l'année 2008-2009, 8 classes de lycée de notre académie ont ainsi été parrainées par des collègues enseignants-chercheurs en physique. Pour l'anne 2009-2010, il a été décidé, à la demande du rectorat, d'élargir cette opération à d'autres lycées de l'académie et à d'autres disciplines scientifiques (chimie, biologie, mathématiques, informatique) ainsi qu'à l'université du Havre. Ce sont donc 25 classes de 22 lycées de l'académie qui vont être parrainées cette année.

Conférences "grand public"

[1] *Le métal : du m^3 à l'atome. L'observer pour connaître ses propriétés.*

Conférence d'approfondissement dans le cadre des *Journées Portes Ouvertes* de l'Université de Rouen (17-01-2002)

[2] *Les lois d'échelle dans les sciences naturelles ou pourquoi les montagnes sont-elles plus hautes sur Mars que sur Terre, pourquoi les autruches ne volent-elles pas, pourquoi l'éléphant vit-il plus longtemps que le singe ou la souris ?*

Conférence dans le cadre de la *Fête de la Science* à l'Université de Rouen (13-10-2005)

[3] *Les lois d'échelle dans les sciences naturelles.*

Conférence dans le cadre de la *Fête de la Science* à Elbeuf-sur-Seine (Seine-Maritime) (13-10-2006)

[4] *L'analyse dimensionnelle à l'origine des lois d'échelle dans les sciences naturelles.*

Conférence "30 minutes pour comprendre" à l'université de Rouen (23-10-2006)

[5] *Les multicouches magnétiques.*

Stage disciplinaire dans le cadre du "Plan Académique de Formation" du rectorat de l'académie de Rouen (04-06-2007)

[6] *De la physique fondamentale à l'ipod : conférence autour du prix Nobel de physique 2007 de Albert Fert.*

Journée Portes Ouvertes pour la présentation des salles de science de l'université de Rouen à destination des professeurs de physique-chimie des collèges et lycées (21-11-2007).

[7] *L'analyse dimensionnelle à l'origine des lois d'échelle dans les sciences naturelles.*

Conférence lors de la journée de présentation des *ateliers scientifiques et techniques* des professeurs de collèges et lycées de l'académie de Rouen, Dieppe (24-04-08).

[8] *Une demi-journée à la pointe de la recherche.*

Présentation des activités des *salles de sciences de l'université de Rouen* dans le cadre des 56^{èmes} Journées nationales de l'Union des Professeurs de Physique et de Chimie, Rouen (27/30-10-08).

[9] *La magie de la lévitation magnétique : l'exemple des supraconducteurs.*

Conférence "30 minutes pour comprendre" à l'université de Rouen (2-02-2009)

Activités d'encadrement

Mes activités d'encadrement d'étudiants de M1, M2 ou doctorat sont listées ci-après dans l'ordre chronologique (les stages de L3 ne sont pas mentionnés).

- Co-encadrement, avec D. Ledue, de Farid Petit pour son stage de DEA sur "l'étude des effets de taille et de surface sur les propriétés magnétiques d'une nanoparticule" en 1999-2000.
- Co-encadrement, avec D. Ledue, de Eugen Dorolti, étudiant de l'université de Cluj (Roumanie) qui a effectué son stage de recherche de DEA dans notre laboratoire sur "l'étude par simulation Monte Carlo du retournement d'aimantation thermiquement activé dans une nanoparticule ferromagnétique" en 2001-2002.
- Encadrement du stage de DEA d'Étienne Talbot sur "l'étude par simulation Monte Carlo du comportement magnétique d'une triloche Fe/Dy/Fe : comparaison avec l'expérience" en 2003-2004.
- Encadrement, avec D. Ledue, de la thèse d'Étienne Talbot sur "l'étude par simulations numériques des propriétés magnétiques de multicouches Fe/Dy" de septembre 2004 à décembre 2007 (thèse soutenue le 4/12/07).
- Encadrement du stage de Master 1 de Thomas Philippe sur "l'étude par simulations Monte Carlo des mécanismes de retournement de l'aimantation dans des multicouches magnétiques" en 2007.
- Co-encadrement, avec C. Bordel, du stage de Master 1 de Marilyne Certain sur "l'étude des propriétés magnétiques des multicouches (Fe/Au)" en 2007.
- Encadrement du stage de Master 2 de Thomas Philippe sur "l'étude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe₂/YFe₂ en simulation numérique" en 2007-2008.
- Co-encadrement de la thèse de Saoussen Djedaï sur "la modélisation et les simulations numériques des propriétés de multicouches magnétiques". Il s'agit d'une thèse réalisée en Algérie à l'université de Tebessa comprenant une collaboration avec le Groupe de Physique des Matériaux de l'université de Rouen financée par le *programme franco-algérien de formation supérieure en France (PROFAS)*. Ce programme permet le séjour en France de Saoussen Djedaï pour 18 mois à compter du mois d'octobre 2009.
- Encadrement, avec Denis Ledue, de la thèse de Adeline Maistre sur la modélisation du couplage d'échange dans les multicouches [Pt/Co]_n-IrMn à partir d'octobre 2009.

Administration

Dans le cadre des activités d'administration de l'enseignement et de la recherche, j'ai exercé les responsabilités suivantes :

- élu au Conseil Scientifique de l'université de Rouen de janvier 2003 à mai 2008,
- élu au bureau du Conseil Scientifique de l'université de Rouen de janvier 2007 à mai 2008,
- élu au Conseil de laboratoire du GPM de janvier 2004 décembre 2007,
- élu à la commission de spécialistes 28-29^{èmes} section de l'université de Rouen en 1999-2000 puis à partir de 2003,
- élu au Comité Technique Paritaire de l'université de Rouen depuis juin 2008,
- responsable pédagogique des salles de travaux pratiques Matériaux (Licence et Master) depuis 2000,
- président du jury de Licence MPM parcours Physique-Chimie 3^{ème} année depuis septembre 2007.

Cette présentation synthétique de mes différentes activités autres que mes activités de recherche ne serait pas complète si je passais sous silence mon investissement syndical au sein de l'université de Rouen, en tant que co-animateur d'une section syndicale. C'est dans le cadre de cet engagement que j'ai été élu, au niveau de l'établissement, au conseil scientifique de 2003 à 2008 et au comité technique paritaire depuis juin 2008.

Sélection d'articles