



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr : SALMI Said

Soutiendra : le 23/01/2021 à 10h

Lieu : Centre de Visioconférence

Une thèse intitulée :

*Etude des propriétés magnétiques et électroniques des ferrites spinelles de types  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  et  $DT_x Fe_{2-x} O_4$  par le développement en séries à haute température, les fonctions de Green et les calculs *ab-initio**

En vue d'obtenir le Doctorat

FD : Sciences des Matériaux et Procédés Industriels (SMPI)

Spécialité : Sciences des Matériaux pour l'énergie et l'environnement

Devant le jury composé comme suit :

	NOM ET PRENOM	GRADE	ETABLISSEMENT
Président	Pr. REZZOUK Abdellah	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Directeur de thèse	Pr. BOUSLYKHANE Khalid	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Co-Directeur	Pr. HOURMATALLAH Ahmed	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Rapporteurs	Pr. CHAHBOUN Adil	PES	Faculté des Sciences et Techniques - Tanger
	Pr. BAHMED Lahoussine	PES	Faculté des Sciences - Rabat
	Pr. MASROUR Rachid	PH	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Membres	Pr. BENZAKOUR Najib	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr. KHARBACH Jaouad	PH	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès

## Résumé :

Dans cette recherche, quatre approches ont été utilisées pour étudier l'effet de la substitution des cations divalents et trivalents sur les propriétés magnétiques et électroniques des ferrites spinelles à base de  $Ni$  et  $Cu$  :

La méthode du développement en séries à haute température (HTSE) combinée avec les approximants de Padé (PA) a été adoptée pour étudier les ferrites spinelles de types  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $D'=Mg, Zn$  ;  $D=Ni, Cu$ ) et  $DT_x Fe_{2-x} O_4$  ( $D=Ni, T=Al$ ). Les résultats obtenus montrent que la température de Curie  $T_C$  diminue avec l'augmentation de la concentration  $x$  de l'ion non magnétique  $D'(T)$  dans l'intervalle  $0 \leq x \leq 1$ . Les valeurs de l'exposant critique  $\gamma$  associé à la susceptibilité magnétique ont été également estimées.

La méthode des fonctions de Green a été également appliquées pour étudier le ferrite de spinelle  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $D'=Cu$  ;  $D=Ni$ ). L'allure de l'aimantation et de la susceptibilité magnétique thermique traduit l'effet de  $Cu$  sur les propriétés magnétiques de  $NiFe_2 O_4$ . Les valeurs de la température critique obtenues par la méthode des fonctions de Green et la technique HTSE, nous permettent de reproduire le diagramme de phase théorique. Les exposants critiques  $\gamma$  et  $\nu$  associés respectivement à la susceptibilité magnétique  $\chi$  et la longueur de corrélation  $\xi$  sont également estimés. Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux des données expérimentales.

Les calculs ab-initio basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code quantum ESPRESSO (QE) et les simulations Monte Carlo ont été utilisés pour étudier les propriétés magnétiques et électroniques du ferrite spinelle  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $D'=Zn, D=Ni$ ). Les résultats obtenus montrent que les moments magnétiques calculés dans le cadre de DFT augmentent avec l'augmentation de la concentration de l'ion non magnétique  $D'$ . L'étude de la densité d'états montre que les systèmes  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $x = 0, 0.5$  et  $1$ ) ont un caractère semi-conducteur. De plus, la bande interdite subit une légère diminution pour  $x = 0.5$ . Les valeurs des températures critiques obtenues des systèmes  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $x = 0, 0.5$  et  $1$ ) par les simulations de Monte Carlo montrent un bon accord avec les résultats théoriques et expérimentaux. Les valeurs de  $T_C$  diminuent avec l'augmentation de la concentration  $x$ . La transition de phase ferrimagnétique-paramagnétique a été observée au voisinage de la température de transition de chaque composé est de type second ordre. Le champ magnétique coercitif et l'aimantation rémanente diminuent avec l'augmentation de la température et le comportement super-paramagnétique est observé pour les trois composés.

**Mots clés :** Ferrites spinelles ; HTSE ; Température Critique ; Fonctions de Green ; ab-initio ; DFT ; Monte Carlo

# Study of the magnetic and electronic properties of spinel ferrites of types $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$ and $DT_x Fe_{2-x} O_4$ by high temperature series expansion, Green's functions and ab-initio calculations

## Abstract:

In this research, four approaches were used to study the effect of the substitution of divalent and trivalent cations on the magnetic and electronic properties of spinel ferrites based on *Ni* and *Cu*:

The method of high temperature series expansion (HTSE) combined with Padé approximants (PA) was adopted to study spinel ferrites of types  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $D'=Mg, Zn; D=Ni, Cu$ ) and  $DT_x Fe_{2-x} O_4$  ( $D=Ni, T=Al$ ). The results obtained show that the Curie temperature  $T_C$  decreases with the increase in the concentration  $x$  of the non-magnetic ion  $D'(T)$  in the interval  $0 \leq x \leq 1$ . The values of the critical exponent  $\gamma$  associated with magnetic susceptibility were also estimated.

The method of Green's functions was also applied to study the spinel ferrite  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $D'=Cu; D=Ni$ ). The pattern of magnetization and thermal magnetic susceptibility reflects the effect of *Cu* on the magnetic properties of  $NiFe_2 O_4$ . The values of the critical temperature obtained by the method of Green's functions and the HTSE technique allow us to reproduce the theoretical phase diagram. The critical exponents  $\gamma$  and  $\nu$  associated respectively with the magnetic susceptibility  $\chi$  and the correlation length  $\xi$  are also estimated. The results obtained are in good agreement with those of the experimental data.

Ab-initio calculations based on density functional theory (DFT) implemented in the ESPRESSO quantum code (QE) and Monte Carlo simulations were used to study the magnetic and electronic properties of the spinel ferrite  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $D'=Zn, D=Ni$ ). The results obtained show that the magnetic moments calculated in the framework of DFT increase with the increase in the concentration of the non-magnetic ion  $D'$ . The study of the density of states shows that the  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $x = 0, 0.5$  and  $1$ ) systems have a semiconductor character. In addition, the forbidden band undergoes a slight decrease for  $x = 0.5$ . The values of the critical temperatures obtained from the  $D'_x D_{1-x} Fe_2 O_4$  ( $x = 0, 0.5$  and  $1$ ) systems by the Monte Carlo simulations show good agreement with the theoretical and experimental results.  $T_C$  values decrease with increasing concentration  $x$ . The ferrimagnetic-paramagnetic phase transition was observed near the transition temperature of each compound is of second order type. The coercive magnetic field and the remanent magnetization decrease with increasing temperature and the super-paramagnetic behavior is observed for all three compounds.

**Keywords:** Spinel ferrites; HTSE; Critical Temperature; Green's functions; ab-initio; DFT; Monte Carlo