



## AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

**Mr. ERCHIDI ELYACOUBI Ahmed Sami**

Soutiendra : le 19/02/2022 à 10H

Lieu : FSDM - Centre Visioconférence

### Une thèse intitulée :

*Etude des Propriétés magnétocaloriques, magnétiques électroniques, des matériaux d'oxydes pérovskite, multiferroïques, et films minces par les simulations Monte Carlo 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
<b>Président</b>	Pr REZZOUK Abdellah	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Directeur de thèse</b>	Pr MASROUR Rachid	PH	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Rapporteurs</b>	Pr BENYOUSSEF Abdelilah	PES	Faculté des Sciences - Rabat
	Pr EL KENZ Abdallah	PES	Faculté des Sciences - Rabat
	Pr HOURMATALLAH Ahmed	PES	Ecole Normale Supérieure - Fès
<b>Membres</b>	Pr BENZAKOUR Najib	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr ZORKANI Izeddine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr BOUSLYKHANE Khalid	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr KHARBACH Jaouad	PH	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
<b>Invité</b>	Pr HAMEDOUN Mohamed	PES	MAScIR- Rabat

# ÉTUDE DES PROPRIÉTÉS MAGNETOCALORIQUES, MAGNETIQUES, ELECTRONIQUES, DES MATERIAUX D'OXYDES PEROVSKITES, MULTIFERROÏQUES ET FILMS MINCES PAR LES SIMULATIONS MONTE CARLO ET LES CALCULS AB INITIO

## Résumé :

Cette thèse de doctorat s'inscrit dans le contexte de l'étude des propriétés magnétocaloriques magnétiques, et électroniques, des matériaux d'oxydes pérovskites, multiferroïques et films minces nanomatériaux par la simulation Monte Carlo et les calculs Ab initio.

Nous avons utilisé les simulations Monte Carlo, pour étudier les propriétés magnétiques, et l'effet magnétocalorique, de la pérovskite  $\text{SmFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  et des doubles pérovskites  $\text{Sr}_2\text{FeM}_6\text{O}_{16}$ . Pour le composé  $\text{SmFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ , l'aimantation en fonction de la température montre que la température de Néel faiblement ferromagnétique diminue lorsque les ions Fe sont remplacés par des ions Mn. L'effet magnétocalorique, montre deux pics liés aux changements de comportement magnétique, au comportement paramagnétique  $T_K$  et à la température de Néel  $T_N$  de  $\text{SmFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ . Les températures de Curie  $T_C$  de  $\text{Sr}_2\text{FeM}_6\text{O}_{16}$  ont été obtenues. La dépendance au champ de la puissance de refroidissement relative, et du cycle d'hystérésis magnétique de ce dernier a été déterminée pour plusieurs champs magnétiques et températures. Par les mêmes simulations, nous avons étudié l'effet de surface sur les propriétés magnétocaloriques des films minces ferromagnétiques de pérovskites. Nous avons déterminé l'aimantation, les températures de transition, la variation d'entropie magnétique, le pouvoir de refroidissement relatif, et la température du cycle d'hystérésis magnétique en fonction de l'épaisseur du film et du couplage d'échange de surface. La température critique réduite  $t_C$  des films minces ferromagnétiques pérovskites est étudiée en fonction de l'épaisseur du film  $L$  et des interactions d'échange. Le RCP augmente avec l'augmentation du champ magnétique externe et il dépend de l'épaisseur du film.

Le couplage magnétoélectrique dans le  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  multiferroïque a été étudié en utilisant aussi les simulations Monte Carlo. La variation de l'aimantation et la polarisation de  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  multiferroïque ont été déterminées. La variation de la polarisation avec le champ magnétique externe de  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  a été donnée. La variation de la polarisation et de l'aimantation avec le champ électrique de  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  a été obtenue.

Après l'étude de l'effet magnétoélectrique dans le  $\text{YFeO}_3$  multiferroïque par les simulations Monte Carlo, la variation de l'aimantation et de la polarisation de  $\text{YFeO}_3$  en fonction de la température a été déterminée, la transition magnétique à la température de transition  $T_C$  et la transition ferroélectrique à  $T_F$  sont obtenues. Le champ magnétique coercitif et l'aimantation rémanente diminuent avec l'augmentation de la température et deviennent égaux à zéro à la température de transition.

La structure du manganite bicouche  $\text{La}_2\text{SrMn}_2\text{O}_7$  a été étudiée à l'aide des calculs Ab initio plus les simulations Monte Carlo, la transition magnétique du ferromagnétique au paramagnétique est trouvée aussi la transition de phase du second ordre est trouvée à la température de transition. La dépendance au champ de la puissance de refroidissement relative de la bicouche de manganite  $\text{La}_2\text{SrMn}_2\text{O}_7$  est donnée pour plusieurs températures.

**Mots-clés :** Simulations Monte Carlo; Ab initio; effet magnétocalorique ; matériaux magnétiques; transition de phase de second ordre ; changement d'entropie magnétique ; cycle d'hystérésis magnétique; comportement superparamagnétique; Magnétisation; polarisation multiferroïque; Transition magnétique; transition ferroélectrique ; Champ magnétique coercitif ; Température de Néel effet magnétocalorique; Puissance de refroidissement relative.

# STUDY OF THE MAGNETOCALORIC, MAGNETIC, AND ELECTRONIC PROPERTIES, OF PEROVSKITE OXIDE MATERIALS, MULTIFERROIC AND THIN FILM BY MONTE CARLO SIMULATIONS AND AB INITIO CALCULATIONS

## Abstract:

This PhD thesis is in the context of the study of the magnetocaloric magnetic and electronic properties of perovskite, multiferroic and thin film oxide materials by Monte Carlo simulation and Ab initio calculations.

We have used Monte Carlo simulations, to study the magnetic properties, and the magnetocaloric effect, of the  $\text{SmFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$  perovskite and the  $\text{Sr}_2\text{FeM}_0\text{O}_6$  double perovskites. For the  $\text{SmFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ , the magnetization as a function of temperature shows that the weakly ferromagnetic Neel temperature decreases when the Fe ions are replaced by Mn ions. The magnetocaloric effect shows two peaks related to the changes of magnetic behavior, the paramagnetic behavior  $T_K$  and the Neel temperature  $T_N$  of  $\text{SmFe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}_3$ . The Curie temperatures  $T_C$  of  $\text{Sr}_2\text{FeM}_0\text{O}_6$  have been obtained. The field dependence of the relative cooling power, and the magnetic hysteresis cycle of the latter has been determined for several magnetic fields and temperatures. By the same simulations, we studied the surface effects on the magnetocaloric properties of ferromagnetic thin films of perovskites. We determined the magnetization, the transition temperatures, the magnetic entropy variation, the relative cooling power, and the magnetic hysteresis cycle temperature as a function of the film thickness and the surface exchange coupling. The reduced critical temperature  $t_C$  of ferromagnetic perovskite thin films is studied as a function of film thickness  $L$  and exchange interactions. The RCP increases with increasing external magnetic field and depends on the film thickness.

The magnetoelectric coupling in multiferroic  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  has been studied using also Monte Carlo simulations. The variation of magnetization and polarization of multiferroic  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  has been determined. The variation of the polarization with the external magnetic field of  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  was given. The variation of polarization and magnetization with the electric field of  $\text{RMn}_2\text{O}_5$  was obtained. After the study of the magnetoelectric effect in multiferroic  $\text{YFeO}_3$  by Monte Carlo simulations, the variation of magnetization and polarization of  $\text{YFeO}_3$  with temperature was determined, the magnetic transition at transition temperature  $T_C$  and the ferroelectric transition at  $T_F$  are obtained. The coercive magnetic field and remanent magnetization decrease with increasing temperature and become equal to zero at the transition temperature.

The structure of the  $\text{La}_2\text{SrMn}_2\text{O}_7$  bilayer manganite has been studied using Ab initio calculations and Monte Carlo simulations, the magnetic transition from ferromagnetic to paramagnetic is found also the second order phase transition is found at the transition temperature. The field dependence of the relative cooling power of the manganite bilayer  $\text{La}_2\text{SrMn}_2\text{O}_7$  is given for several temperatures.

**Keywords:** Monte Carlo simulations; Ab initio; magnetocaloric effect; magnetic materials; second-order phase transition; magnetic entropy change; magnetic hysteresis cycle; superparamagnetic behavior; magnetization; multiferroic polarization; magnetic transition; ferroelectric transition; coercive magnetic field; Neel temperature magnetocaloric effect; relative cooling power