GEMaC
Groupe d'Étude
de la Matière Condensée

ANALYSE DU COMPORTEMENT HYSTÉRÉTIQUE DANS LES NANOMATÉRIAUX BISTABLES À TRANSITION DE SPIN ET SES APPLICATIONS DANS LES DISPOSITIFS ÉLECTRONIQUES

Présentée par Daniel-Gabriel Chiruta
Discipline : physique - milieux denses et matériaux
Laboratoire : GEMaC

Résumé :
L'objectif principal de ce travail est d'appliquer des méthodes exactes (matrice de transfert) ou semi-exactes (en utilisant des simulations Monte Carlo avec l'algorithme de l' échantillonnage entropique) à l'étude du comportement des matériaux moléculaires.

Nous avons utilisé le modèle type-Ising en tenant compte des interactions à courte et à longue portée afin de simuler la réponse à des effets extérieurs dans des composés à transition de spin de taille macroscopique ainsi que des tailles nanométriques. Grâce à leur bistabilité ces composés à transition de spin sont potentiellement utilisables dans la fabrication de nouveaux dispositifs (capteurs de températures et/ou de pression, stockage de l'information). Notre travail contient deux parties. La première partie, les trois premiers chapitres, est consacrée à l'état de l'art des matériaux à transition de spin (SCO) et à la description de modèles et méthodes proposés pour expliquer le phénomène de transition de spin. La deuxième partie, les 4 derniers chapitres, concerne nos études théoriques sur l'effet de la taille, la forme et l'effet des molécules en surface dans le domaine des matériaux à transition de spin.
Cette thèse, dans le domaine de la Sciences des matériaux, traite à travers tous ces chapitres de deux axes. Dans un premier axe nous avons modélisé et simulé le comportement de plusieurs matériaux SCO existant en utilisant le modèle type Ising afin de comprendre le mécanisme de transition de spin. Nous avons également analysé les effets des différents facteurs extérieurs, notamment l'effet des molécules en surface, dans les composés à transition de spin avec différents types de configurations : 1D, 2D et 3D. Ayant trouvé un bon accord entre les résultats numériques et les données expérimentales, nous avons étudié de nouveaux comportements thermiques de ces matériaux à transition spin obtenus expérimentalement : transition incomplète et transition à plusieurs étapes.

Abstract :

The main purpose of this thesis is to develop exact methods (i.e. Matrix transfer) or semi-exact methods (using Monte Carlo technique with entropic sampling algorithm) to study the behaviour of molecular materials. Using an Ising like model that takes into account both short-range and long-range interactions in Spin Crossover (SCO materials) the response resulting from the spin state switching phenomenon (from bulk materials down to nanoscale size) was simulated. SCO materials have potential applications in the fabrication of novel devices (i.e. storing information, sensing, and display). This work contains two main parts divided in seven chapters. The first part, the first three chapters, is devoted to some overview of SCO materials and to the description of several models and methods proposed to explain the Spin Transition (ST) phenomenon while the second part, the last four chapters, is focused on some theoretical studies on size and shape effects as well as the molecules at the surface effect in the SCO area which is a new subject.
This thesis, in the field of Computing Materials Science, treats two axes. In the first axe we have modeled and simulated the behaviour of several existing materials using an

Ising like model in order to understand the ST mechanism and the effects of different external factors in different SC compounds in 1D, 2D or 3D structures. From the good agreement between the numerical and the experimental data in the first part, we have studied in the second part different architectures and we have predicted some novel SCO behaviours, obtained recently experimentally, as incomplete or multi-step transition.

Membres du jury :

Hung T.DIEP, professeur des universités, université de Cergy-Pontoise/département de physique - Cergy-Pontoise - rapporteur
Cristian ENACHESCU, maître de conférences, université de Al. I. Cuza/département de physique - Iasi (Roumanie) - rapporteur
Jorge LINARES, professeur des universités, université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines/laboratoire Groupe d'étude de la matière condensée (GEMAC) - Versailles - directeur de thèse
Adrian GRAUR, professeur des universités, University Stefan Cel Mare/Faculty of Electrical Engineering and Computer Science - Suceava (Roumanie) - Codirecteur de thèse
Pierre-Richard DAHOO, professeur des universités, université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines/Laboratoire atmosphères, milieux, observations spatiales (LATMOS) - Guyancourt - examinateur
Talal MALLAH, professeur des universités, université Paris-Sud 1/Laboratoire de chimie inorganique et materiaux moleculaires - Orsay - examinateur
Mihai DIMIAN, professeur des universités, University Stefan Cel Mare/Faculty of Electrical Engineering and Computer Science - Suceava (Roumanie) - invité
Aurelian ROTARU, docteur, University Stefan Cel Mare/Faculty of Electrical Engineering and Computer Science - Suceava (Roumanie) - invité