

Proposition de sujet de thèse 2026

« Etude des propriétés magnétiques de nanoparticules en interactions : développement d'une nouvelle approche de modélisation par simulations Monte Carlo et application à des nanoparticules de cobalt et d'oxydes de fer »

Directeur de thèse : D. Ledue

Collaboration H. Kachkachi, Université de Perpignan Via Domitia, Laboratoire PROMES - CNRS UPR8521

Résumé du projet

Ce projet porte sur la mise au point d'une nouvelle approche de modélisation, par simulations Monte Carlo, des propriétés magnétiques (aimantation, susceptibilité, capacité thermique ...) d'assemblées de nanoparticules (NP) ferromagnétiques (FM) (voir figure). Les assemblées de NP FM présentent des applications, notamment dans le domaine de l'imagerie médicale par résonance magnétique, de l'hyperthermie magnétique et de l'enregistrement magnétique à très haute densité. Cette thématique a donc un intérêt aussi bien fondamental que sur le plan des applications. Une NP FM est constituée de quelques dizaines de milliers d'atomes magnétiques (par exemple du cobalt). L'aimantation d'une NP dépend de ses propriétés intrinsèques que sont, entre autres, son anisotropie de surface, sa taille et sa forme. Une assemblée de NP est un ensemble de NP placées régulièrement ou aléatoirement dans un certain volume. Dans une assemblée de NP FM, les aimantations des différentes NP interagissent entre elles par l'intermédiaire des interactions dipolaires (ID). L'aimantation de l'assemblée (égale à la somme des aimantations des NP) dépend donc des propriétés intrinsèques de chaque NP et des ID. La modélisation d'assemblées de NP FM doit donc prendre en compte les propriétés intrinsèques et les ID ce qui nécessiterait de considérer de l'ordre de 100 millions d'atomes en interactions. Ceci conduirait à des temps de calculs prohibitifs au vu des capacités des supercalculateurs actuels. C'est pourquoi, nous proposons une nouvelle approche de modélisation permettant de prendre en compte les propriétés intrinsèques et les ID tout en gardant des temps de calculs acceptables. Le but de cette modélisation est une meilleure compréhension de la compétition entre les effets des propriétés intrinsèques des NP et des ID sur l'aimantation de différents types d'assemblées de NP. Nos résultats seront comparés à des résultats expérimentaux afin de permettre d'optimiser et de contrôler les propriétés magnétiques des assemblées en vue d'applications.

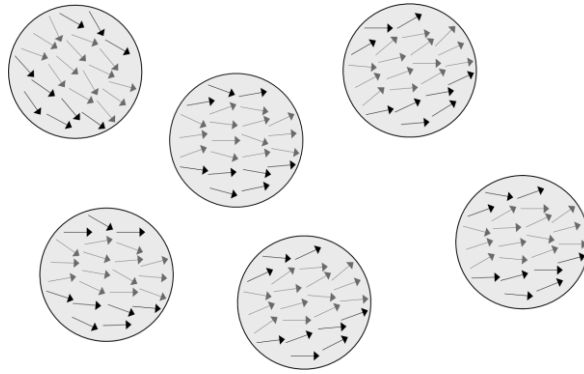


Figure : assemblée de NP contenant chacune au moins 10^3 atomes. Chaque flèche représente un moment magnétique atomique qui est en interaction avec tous les autres moments magnétiques atomiques de l'assemblée.

Objectifs de la thèse

Les objectifs de ce travail de thèse sont :

- de développer un code de simulation Monte Carlo basé sur une nouvelle approche de modélisation à l'échelle atomique capable de prendre en compte les propriétés intrinsèques (taille, forme et anisotropie de surface) de chaque NP mais également les ID à longue distance entre NP quelle que soit leur intensité ;
- de tester et valider cette approche ;
- d'optimiser le code de simulation ;
- de modéliser les propriétés magnétiques d'assemblées réalistes de NP de cobalt et d'oxydes de fer et de les comparer aux résultats expérimentaux en vue d'applications.

Mots clés : nanoparticules, ferromagnétique, aimantation, simulations Monte Carlo, anisotropie de surface, interactions dipolaires.

Compétences requises : le candidat devra avoir de bonnes bases en magnétisme des solides et être attiré par la simulation numérique et la programmation.

Financement : allocation établissement (environ 1400 euros net/mois).

Contact : Pr. D. Ledue, Enseignant-Chercheur (denis.ledue@univ-rouen.fr).