AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

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

Mr **BELHAMRA Said**
Soutiendra : **le Samedi 22/02/2025** à **10H00**
Lieu : ***FSDM – Centre Visioconférence***

Une thèse intitulée :

«Étude de l'effet magnétocalorique, des propriétés magnétiques et électroniques des films et super réseau par calculs Ab initio et simulations Monte Carlo»

En vue d'obtenir le ***Doctorat***

FD : ***Sciences des Matériaux et Procédés Industriels***
Spécialité : ***Sciences des Matériaux pour l'énergie et l'environnement***

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
REZZOUK Abdellah	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
BENYOUSSEF Abdelilah	Faculté des Sciences de Rabat/ Académie Hassan II des Sciences et Techniques, Rabat	PES	Rapporteur & examinateur
BENHAMOU Mabrouk	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur & examinateur
KHARBACH Jaouad	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Rapporteur & examinateur
BOUTAHAR Abderrahim	Ecole Nationale des Sciences Appliquées, El Jadida	MCH	Examinateur
LEMZIOUKA Hamane	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Examinateur
HAMEDOUN Mohammed	MASCIR, Rabat	PES	Invité
MASROUR Rachid	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse

Résumé :

En raison de l'importance des nouveaux matériaux dans les technologies émergentes, cette thèse de doctorat s'inscrit dans le cadre de l'étude de l'effet magnétocalorique, des propriétés magnétiques et électroniques des films et super réseau par calculs Ab initio et simulations Monte Carlo.

Dans une première partie, nous avons commencé par introduire les propriétés magnétiques et l'hystérésis des matériaux, ainsi que le comportement de ces propriétés au voisinage des points critiques des transitions de phase. Ensuite, nous avons détaillé certaines des méthodes de simulation et de calcul utilisées, telles que la méthode Monte Carlo (MC), la théorie du champ moyen, et la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Par la suite, nous avons présenté nos contributions concernant les matériaux de type pérovskite, double pérovskite, des super réseaux et films avec différentes morphologies. Une attention particulière a été portée aux paramètres physiques influençant la température de transition magnétique. Avec tous ces éléments, nous nous sommes ouverts aux développements les plus récents dans la physique des nouveaux matériaux. Enfin, nous avons conclu par une discussion sur les perspectives.

Mots clé :

Monte Carlo, DFT, Curie, Transition, magnétocalorique, magnétique, électronique

STUDY OF THE MAGNETOCALORIC EFFECT, MAGNETIC AND ELECTRONIC PROPERTIES OF FILMS AND SUPERLATTICES BY AB INITIO CALCULATIONS AND MONTE CARLO SIMULATIONS

Abstract:

Due to the importance of new materials in emerging technologies, this doctoral thesis focuses on the study of the magnetocaloric effect, as well as the magnetic and electronic properties of films and superlattices through Ab initio calculations and Monte Carlo simulations.

In the first part, we begin by introducing the magnetic properties and hysteresis of materials, as well as the behavior of these properties near the critical points of phase transitions. Next, we detail some of the simulation and calculation methods used, such as the Monte Carlo (MC) method, mean field theory, and density functional theory (DFT).

Subsequently, we present our contributions regarding perovskite, double perovskite materials, superlattices, and films with different morphologies. Particular attention is given to the physical parameters influencing the magnetic transition temperature. With all these elements, we engage with the latest developments in the physics of new materials. Finally, we conclude with a discussion on perspectives.

Keywords:

Monte Carlo, DFT, Curie, Transition, magnetocaloric, magnetic, electronic