«MODÉLISATION ET SIMULATION DU COMPORTEMENT SPATIOTEMPOREL DES TRANSITIONS DE PHASE DANS LES MONOCRISTAUX MOLÉCULAIRES À TRANSITION DE SPIN» PAR MIGUEL ANGEL PAEZ ESPEJO

Présentée par : Miguel Angel Paez Espejo Discipline : physique Laboratoire : GEMAC

Résumé :
Ce travail est dédié à la modélisation multi-échelle des phénomènes liés à la transition de spin dans des composés du Fe(II).
Le développement d'un modèle macroscopique type réaction-diffusion pour la transition de phase à partir de l'Hamiltonien d'Ising a permis l'étude théorique des aspects spatio-temporels de la fraction haut-spin lors de la transition de phase du premier ordre dans des monocristaux commutables.
La comparaison à l'expérience a conduit à de très bons accords pour le comportement du front de transition, ce qui a permis de mieux comprendre les mesures de microscopie optique.
Ce travail a été étendu à l'étude des effets photo-thermiques qui causent l'échauffement du cristal par la lumière du microscope conduisant à un système d'équations différentielles couplées tenant compte du couplage thermique avec le bain.
Ces équations prédisent des comportements non-linéaires du cristal dans son domaine bistable, tels que l’existence d’effets autocatalytiques, dont les conditions d'émergence ont été précisées.

La dernière partie de la thèse est consacrée à une extension du modèle électro-élastique. Ici on démontre que la frustration élastique est à l'origine de la transition de spin en deux étapes et des transitions incomplètes.
Ceci nous a amené aussi à prédire l'organisation de structures complexes de la fraction haut-spin dans les phases intermédiaires.
Plusieurs types d'auto-organisation ont été révélés dont des structures modulées de la fraction haut-spin. Ce type de comportements a été observé expérimentalement très récemment dans les composés à transition de spin.

Abstract :
This work is devoted to the multiscale modeling of the spin transition phenomena in Fe(II) spin crossover compounds.
The development of a macroscopic reaction-diffusion-like model for the phase transition from the Ising-like Hamiltonian allowed the theoretical study of the spatio-temporal behavior of the high-spin fraction accompanying the first-order phase transition in switchable spin crossover single crystals.
The comparison to experiments led to an excellent agreement for the dynamics of the high-spin/low-spin interface which improved the understanding of the optical microscopy measurements.
Next, this work was extended to the study of photothermic effects due to the crystal heating by the light of the microscope leading to a coupled system of differential equations accounting for the thermal coupling with the bath temperature.
These equations predict nonlinear behaviors for crystals in the bistable region, such as the autocatalytic effects, for which we established the conditions of their emergence.
The last part of this thesis is devoted to an extension of the electro-elastic model. Here we prove that the elastic frustration is at the origin of the existence of two-step and of incomplete spin crossover transitions. Furthermore, this model allowed us to predict structures of complex patterns in high-spin fractions for intermediate phases.
Several types of self-organisation were revealed such as the spatially-modulated structures of the high-spin fractions.
Some of these behaviors have been experimentally observed, very recently, in spin crossover compounds.

INFORMATIONS COMPLÉMENTAIRES

Bernard BARBARA, Directeur de Recherches CNRS, à l'Institut Néel/Département de Nanosciences - Grenoble - Rapporteur
Hung T.DIEP, Professeur des Universités, à l'Université de Cergy-Pontoise

/Département de Physique - Cergy-Pontoise - Rapporteur
Kamel BOUKHEDDADEN, Professeur des Universités, à l'Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines/Laboratoire Groupe d'Etude de la Matière Condensée (GEMAC) - Versailles - Directeur de thèse
Jorge LINARES, Professeur des Universités, à l'Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines/Laboratoire Groupe d'Etude de la Matière Condensée (GEMAC) - Versailles - Examinateur
Jean-Claude Serge LEVY, Professeur Emérite, à l'Université Paris Diderot/Laboratoire Matériaux et Phénomènes Quantiques - Paris - Examinateur
Sébastien PILLET, Chargé de Recherches CNRS, à l'Université de Lorraine /Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisations - UMR CNRS 7036 - Vandoeuvre-lès-Nancy - Examinateur
François VARRET, Professeur Emérite, à l'Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines/Laboratoire Groupe d'Etude de la Matière Condensée (GEMAC) - Versailles - Invité

Contact : dredval service FED : theses@uvsq.fr