

## Mémoire

**Auteur** : Wafflard, Adrien

**Promoteur(s)** : Vandewalle, Nicolas

**Faculté** : Faculté des Sciences

**Diplôme** : Master en sciences physiques, à finalité approfondie

**Année académique** : 2020-2021

**URI/URL** : <http://hdl.handle.net/2268.2/12233>

---

### *Avertissement à l'attention des usagers :*

*Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.*

*Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.*

---



UNIVERSITÉ DE LIÈGE

Travail présenté en vue de l'obtention  
du diplôme de Master en Sciences Physiques

---

# Magnétostructures : des chaînes aux magnétocristaux

---

Adrien Wafflard

*Promoteur :*  
Prof. Nicolas VANDEWALLE

*Comité de lecture :*  
Prof. Thierry BASTIN  
Prof. Geoffroy LUMAY  
Prof. Éric BOUSQUET

Année Académique 2020-2021



# Avertissement

*Les moyens de calcul ont été fournis par les infrastructures de l'Université Catholique de Louvain (CISM/UCL) et de l'Université de Liège (SEGI), et par le Consortium des Équipements de Calcul Intensif (CÉCI), financé par le Fonds de la Recherche Scientifique de Belgique (F.R.S.-FNRS) sous la convention n° 2.5020.11 et par la Région Wallonne.*





# Remerciements

Je voudrais avant toute chose remercier mon promoteur Pr. Nicolas Vandewalle, pour son implication, sa disponibilité et ses conseils qui ont permis l'élaboration de ce travail durant cette année particulière.

Je voudrais également remercier les membres du GRASP, d'avoir accepté que je me joigne à leurs réunions et qui m'ont également donné de nombreux conseils.

Je voudrais également remercier Pr. Thierry Bastin, Pr. Geoffroy Lumay et Pr. Éric Bousquet d'avoir accepté de relire ce manuscrit.

Finalement, je souhaite remercier mes proches et amis pour leur soutien et leurs conseils durant toutes mes années d'étude.



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Magnétostructures</b>	<b>5</b>
2.1	Dipôles . . . . .	5
2.2	Interaction dipolaire . . . . .	7
2.3	Chaînes et anneaux . . . . .	10
2.4	Feuillets 2D . . . . .	12
2.5	Structures 3D . . . . .	13
2.6	Résumé . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Simulations numériques</b>	<b>17</b>
3.1	Approche numérique . . . . .	17
3.2	Puissance de calcul . . . . .	19
3.3	Résumé . . . . .	19
<b>4</b>	<b>Magnétotubes</b>	<b>21</b>
4.1	Description d'un magnétotube . . . . .	21
4.2	Empilement carré . . . . .	21
4.2.1	$\ell$ pair . . . . .	21
4.2.2	$\ell$ impair . . . . .	23
4.3	Empilement hexagonal . . . . .	26
4.4	Résumé . . . . .	26
<b>5</b>	<b>Réorientation des dipôles</b>	<b>29</b>
5.1	Objectifs du chapitre . . . . .	29
5.2	Réorientation des dipôles . . . . .	30
5.2.1	Étude expérimentale de la réorientation . . . . .	30
5.2.2	Étude numérique de la réorientation . . . . .	33
5.3	Écrasement du magnétotube . . . . .	33
5.4	Forces de frottement . . . . .	36
5.4.1	Cas simple : $\alpha = 0$ . . . . .	37

---

5.4.2	Cas complexe : $\alpha(\theta)$ . . . . .	39
5.5	Résumé . . . . .	41
<b>6</b>	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>43</b>

# Chapitre 1

## Introduction

Dans les rayons de certains magasins de jouets, on trouve des boîtes de jeux contenant de petites billes magnétiques. Derrière ces jouets d'apparence anodine se cache une physique plutôt complexe. En effet, ces billes sont de petits aimants assimilables à des dipôles, qui peuvent s'assembler pour former des structures ordonnées ou non, comme sur la Figure 1.1. On observe que sur la figure de gauche les billes se sont auto-assemblées de manière déstructurée, sans réel réseau. Inversement, à droite, nous avons formé un assemblage contenant le même nombre de billes, mais cette fois-ci selon une structure particulière, un parallélépipède rectangle, avec un réseau cristallin cubique. À la manière des cristaux, dont la structure atomique est bien définie, les **magnétocristaux** voient la position et l'orientation des dipôles magnétiques des billes dans une configuration bien spécifique.

Étudier ces petits aimants permet de mieux comprendre les auto-assemblages

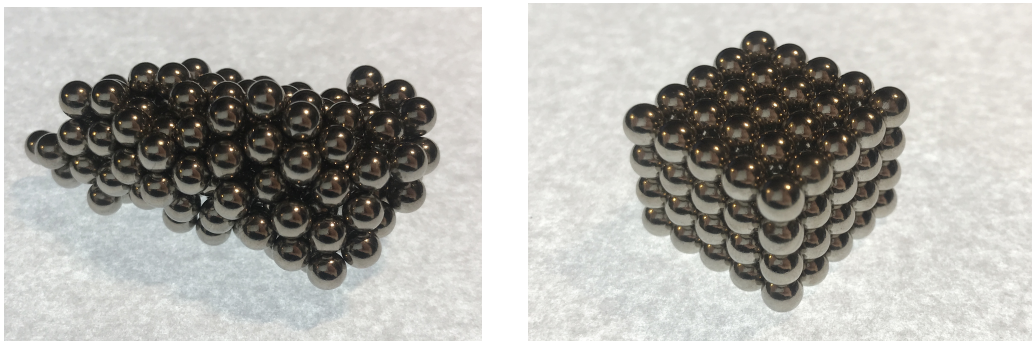


FIGURE 1.1 – **À gauche** : auto-assemblage de billes magnétiques non structuré. **À droite** : Assemblage de billes magnétiques formant une structure ordonnée.

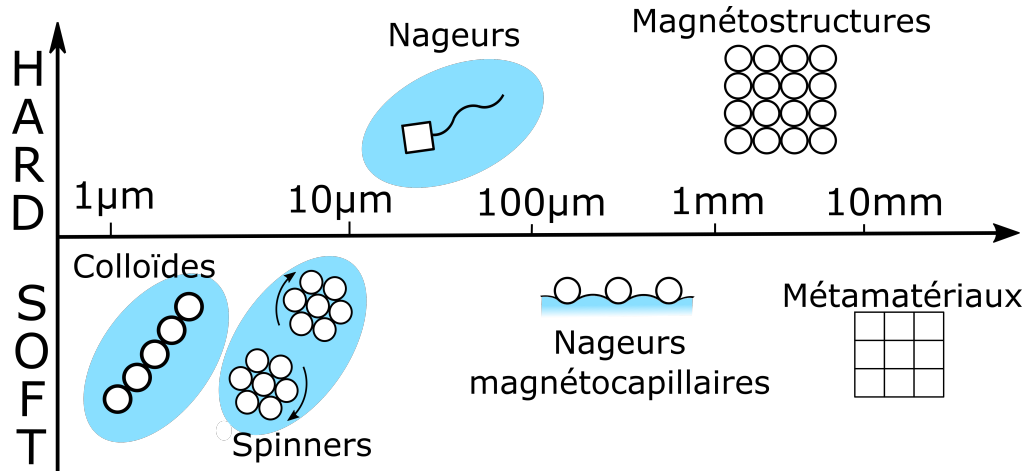


FIGURE 1.2 – Le domaine des magnétostructures s’inscrit dans l’étude très large des auto assemblages, aux cotés des colloïdes ou des nageurs par exemple. Contrairement aux colloïdes qui ont besoin d’un champ magnétique externe pour s’assembler, les magnétostructures sont *hard* ferromagnétiques, et n’ont donc pas besoin que l’on applique un champ magnétique externe pour s’auto assembler. L’échelle de taille caractéristique est également différent.

de particules magnétiques [1, 2, 3, 4, 5], notamment des colloïdes magnétiques [3, 6], qui peuvent avoir plusieurs applications concrètes. En effet, les particules magnétiques peuvent s’assembler pour former de longues chaînes [6, 7] (colloïdes sur la Figure 1.2) qui peuvent par exemple être utilisées comme des cils ou flagelles artificiels et peuvent ensuite être déplacés à l’aide de champs magnétiques externes dans un liquide [2, 7] ou à la surface d’un liquide [8, 9] (spinners, nageurs et nageurs magnétocapillaires sur la Figure 1.2). Ainsi, *Yuge et al.* ont réussi à piéger des bactéries *E. coli* au sein de microtubes. Une fois piégées, il devient alors facile, à l’aide d’un champ magnétique externe (un simple aimant par exemple) de déplacer et confiner ces bactéries [10]. Les auto-assemblages sont donc un atout non négligeable pour la microfabrication de particules auto-propulsées, mais également en microélectronique, pour la fabrication de micro actuateurs ou autres microsystemes 3D [1]. Ainsi, certains matériaux sont capables, sous l’action d’un champ magnétique extérieur de se reconfigurer [11]. La Figure 1.2 reprend les différents auto-assemblages de particules magnétiques à différentes échelles. Les particules *soft* ferromagnétiques ont besoin de l’application d’un champ extérieur pour s’assembler, tandis que les *hard* ferromagnétiques non.

Parmi ces auto-assemblages, nous nous intéresserons donc aux magnétostructures. Ce travail consiste en la **recherche de l’orientation des dipôles minimisant l’énergie d’interaction dans une structure donnée**, en particulier des

tubes. Nous allons nous intéresser à l'évolution de l'énergie lorsque l'on fait varier les dimensions de ces magnétostructures. Pour cela, nous allons adopter deux approches pour comprendre les différents arrangements des dipôles : (i) une approche numérique, où nous faisons des simulations numériques et (ii) une approche expérimentale où nous tenterons de confronter observations et résultats numériques.





# Chapitre 2

## Magnétostructures

### 2.1 Dipôles

Pour parler d'interaction dipolaires, il faut évidemment posséder des dipôles. Or, est-on sûr que les aimants avec lesquels nous travaillons sont assimilables à des dipôles ? Nous sommes en présence de **sphères** ferromagnétiques<sup>1</sup>, autrement dit, des aimants permanents. Si elles sont **uniformément magnétisées**, alors ces billes sont assimilables à des dipôles ponctuels [12], comme nous l'établirons plus bas. Si nous avons opté pour une autre géométrie pour nos aimants, nous n'aurions pas la même conclusion [13].

En l'absence de champ électrique ou de champ magnétique dépendant du temps, on peut restreindre les équations de Maxwell à leur expression de la magnétostatique ; soit

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 \\ \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \mu_0 \vec{J}.\end{aligned}\tag{2.1}$$

On peut considérer que  $\vec{J} = \vec{0}$ , ce qui implique dès lors que  $\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{0}$ . On peut alors introduire un potentiel scalaire  $\phi_M$  tel que

$$\vec{H} = -\vec{\nabla} \phi_M.\tag{2.2}$$

Une première méthode consiste à résoudre l'équation de Laplace  $\nabla^2 \phi_M = 0$  en coordonnées sphériques, que l'on obtient en combinant les équations (2.1) et (2.2) [14, 15]. Une autre méthode consiste à résoudre l'équation

$$\phi_M(\vec{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\vec{\nabla}' \cdot \vec{M}'(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3 \vec{x}',$$

---

1. Alliage de néodyme-fer-bore

qui admet comme solution en coordonnées sphériques

$$\phi_M(r, \theta) = \frac{1}{3} M_0 a^3 \frac{r_{<}}{r_{>}^2} \cos \theta, \quad (2.3)$$

où  $a$  est le rayon de la sphère [12]. À l'intérieure de la sphère,  $r_{<} = r$  et  $r_{>} = a$ , et on obtient pour le potentiel

$$\phi_{in} = \frac{1}{3} M_0 r \cos \theta = \frac{1}{3} M_0 z \quad (2.4)$$

Ainsi, à l'intérieur de la sphère, le champ magnétique donné par Eq. (2.2) est uniforme et vaut

$$\vec{H}_{in} = -\frac{1}{3} M_0 \vec{e}_z.$$

À l'extérieur de la sphère,  $r_{<} = a$  et  $r_{>} = r$  et le potentiel scalaire vaut

$$\phi_{out}(r, \theta) = \frac{1}{3} M_0 a^3 \frac{\cos \theta}{r^2}. \quad (2.5)$$

Ainsi, en utilisant encore une fois Eq. (2.2), on obtient le champ magnétique extérieur (en coordonnées sphériques)

$$\vec{H}_{out} = \frac{a^3 M_0}{3r^3} (2 \cos \theta \vec{e}_r + \sin \theta \vec{e}_\theta). \quad (2.6)$$

Étant donné que  $\vec{m} = V \vec{M} = \frac{4\pi a^3}{3} \vec{M}$ , et  $\vec{e}_z = \cos \theta \vec{e}_r - \sin \theta \vec{e}_\theta$ , l'équation précédente devient

$$\vec{H} = \frac{m}{4\pi r^3} (3 \cos \theta \vec{e}_r - \vec{e}_z), \quad (2.7)$$

où  $m \cos \theta = \vec{m} \cdot \vec{e}_r$ ,  $\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r}$  et  $\vec{m} = m \vec{e}_z$ , ce qui donne alors

$$\vec{H} = -\frac{1}{4\pi} \left[ \frac{\vec{m}}{r^3} - 3 \frac{(\vec{m} \cdot \vec{r}) \vec{r}}{r^5} \right]. \quad (2.8)$$

On obtient donc finalement l'expression du champ magnétique créé par une sphère

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left[ \frac{\vec{m}}{r^3} - 3 \frac{(\vec{m} \cdot \vec{r}) \vec{r}}{r^5} \right] \quad (2.9)$$

qui est le même que celui créé par un dipôle [12, 15, 14].

Bien que ce résultat soit purement théorique, ce type de bille ferromagnétique a été étudié avec une sonde à effet Hall afin de prouver ce résultat. Il a été montré que l'on peut supposer une sphère au néodyme comme un dipôle ponctuel car la déviation est de l'ordre de 1% [16, 17].

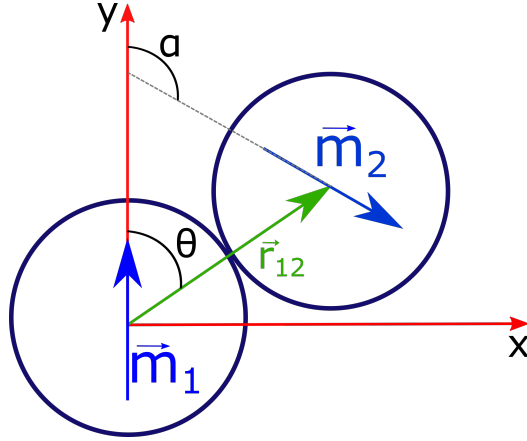


FIGURE 2.1 – Schéma de deux billes magnétiques en contact l’une avec l’autre, où sont représentés les angles  $\alpha$  et  $\theta$ .

## 2.2 Interaction dipolaire

Si les structures formées par les billes sont stables, c’est qu’elles minimisent d’une certaine manière l’énergie d’interaction magnétique entre ces dipôles. Cette énergie pour deux dipôles  $\vec{m}_i$  et  $\vec{m}_j$  est définie par

$$U_{ij} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[ \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right], \quad (2.10)$$

où  $\vec{r}_{ij}$  est le vecteur joignant les deux dipôles  $\vec{m}_i$  et  $\vec{m}_j$  [12]. Ce résultat découle directement de l’équation (2.9), car l’énergie d’un dipôle dans un champ magnétique  $\vec{B}$  est donné par

$$U = -\vec{m} \cdot \vec{B} \quad (2.11)$$

[15, 14]. L’énergie d’interaction totale vaut quant à elle, la somme des énergies d’interaction entre chaque paire de dipôles,

$$U_{tot} = \sum_{i>j} U_{ij}. \quad (2.12)$$

Pour trouver le minimum d’énergie de la structure, il nous faut donc connaître les positions des dipôles, mais également leurs orientations. Une bille possède donc 5 degrés de liberté : *trois coordonnées spatiales et deux angles d’orientation*.

Intéressons nous désormais à l’énergie d’interaction entre deux billes en contact comme sur la Figure 2.1. Celle-ci est donnée par l’équation (2.10). Notons  $\vec{m}_1$  et  $\vec{m}_2$  les deux dipôles magnétiques, et  $\vec{r}_{12}$  le vecteur position entre ces deux dipôles. Notons

également  $\theta$  l'angle entre les deux billes (c'est à dire entre les vecteurs  $\vec{m}_1$  et  $\vec{r}_{12}$ ), et  $\alpha$  l'angle entre les dipôles. Nous avons alors

$$\begin{aligned}\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 &= m_1 m_2 \cos(\alpha), \\ \vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{12} &= m_1 r_{12} \cos(\theta), \\ \vec{m}_2 \cdot \vec{r}_{12} &= m_2 r_{12} \cos(\alpha - \theta).\end{aligned}\tag{2.13}$$

En injectant ce résultat dans (2.10), on obtient

$$U_{12} = \frac{\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r_{12}^3} [\cos(\alpha) - 3 \cos(\theta) \cos(\alpha - \theta)].\tag{2.14}$$

Cette équation nous donne donc l'énergie d'interaction entre les dipôles en fonction des angles  $\alpha$  et  $\theta$  ainsi que la distance  $r_{12}$ . Dans le cas de deux billes, il s'agit également de l'énergie totale. Nous allons maintenant adimensionner notre relation dans le but de se débarrasser des constantes et des moments magnétiques  $m_1$  et  $m_2$  que l'on suppose égaux en norme car nous sommes en présence de billes identiques, et la normaliser par le diamètre  $d$  des billes car elles sont en contact. Pour se faire nous définissons donc une constante

$$U_0 = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi d^3},\tag{2.15}$$

où  $m$  est le moment magnétique d'une bille. Ce coefficient est en réalité l'énergie d'interaction de deux billes en contact dont les dipôles sont parallèles, et orientés dans la même direction ( $\alpha = 0$  et  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ) comme sur la Figure 2.2. Lorsque nous aurons des structures plus complexes, et que nous comparerons les énergies de structures composées d'un nombre différent de billes entre elles, nous allons également normaliser l'énergie totale par le nombre de billes  $N$ .

Nous venons de définir une **énergie totale adimensionnelle**, normalisée par le nombre de billes que l'on peut écrire

$$u = \frac{1}{N} \frac{U_{tot}}{U_0}.\tag{2.16}$$

Désormais, nous utiliserons cette grandeur lorsque nous parlerons d'énergie de cohésion magnétique. Calculons donc cette énergie pour deux billes suivant l'orientation des dipôles. En normalisant l'énergie (2.14), on obtient simplement

$$u = \frac{1}{2} [\cos(\alpha) - 3 \cos(\theta) \cos(\alpha - \theta)].\tag{2.17}$$

Si les deux dipôles sont alignés, on obtient

$$\left. \begin{array}{l} \theta = 0, \\ \alpha = 0, \end{array} \right\} \Rightarrow u = -1,$$

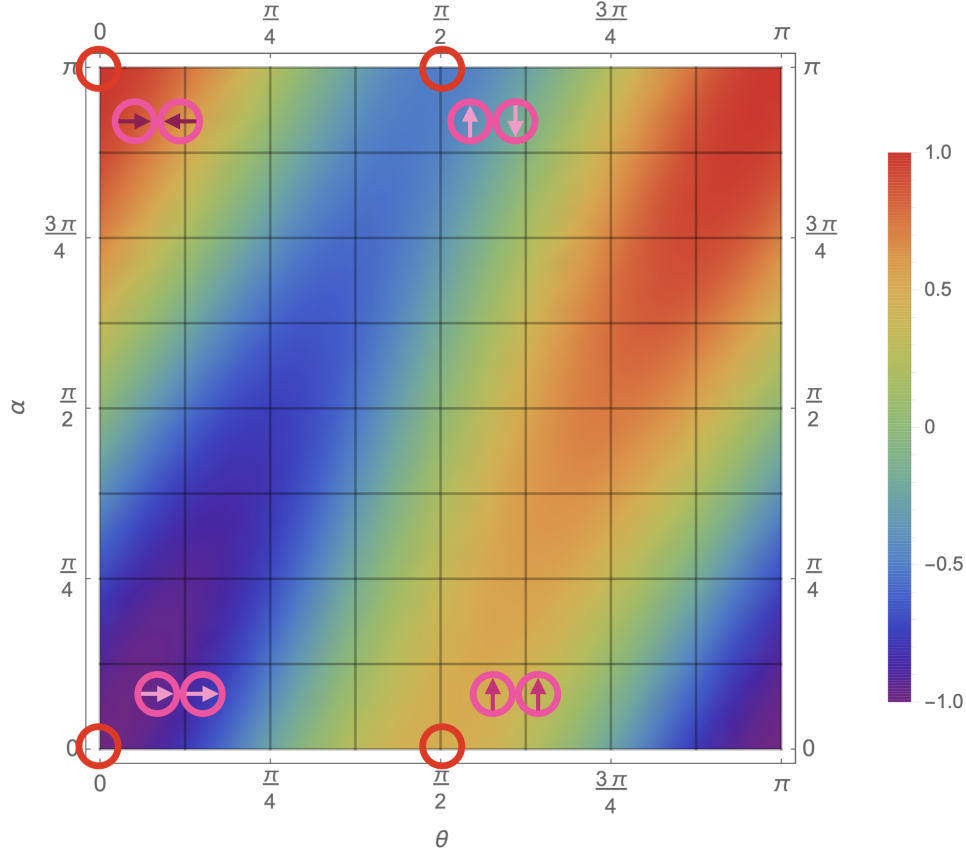


FIGURE 2.2 – Profil du paysage énergétique  $u$  de deux billes magnétiques en contact en fonction des angles  $\alpha$  et  $\theta$ . On remarque que les zones de cohésion minimale se trouvent en  $\alpha = 0$  et  $\theta = k\pi, k \in \mathbb{Z}$ , correspondant à l’alignement des dipôles. Les zones froides (en bleu) correspondent à des faibles énergies (situations énergétiquement favorables) contrairement aux zones chaudes (en rouge) qui correspondent à de hautes énergies (situations instables). Quatre situations particulières sont représentées et discutées dans le texte.

ce qui conduit à une situation attractive. Inversement, si les pôles opposés se font face, on a

$$\left. \begin{array}{l} \theta = 0, \\ \alpha = \pi, \end{array} \right\} \Rightarrow u = 1,$$

correspondant à une situation répulsive. Nous avons définis le coefficient de normalisation (2.15) comme étant l’énergie d’interaction entre deux billes lorsque  $\alpha = 0$  et

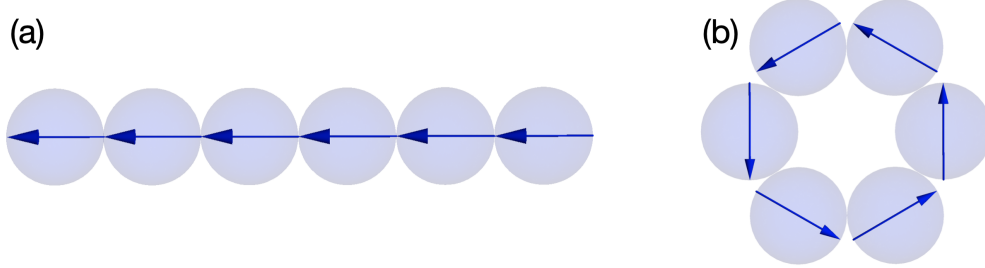


FIGURE 2.3 – Deux structures stables à une dimension : (a) Chaîne de 6 dipôles magnétiques. (b) Anneau de 6 dipôles magnétiques.

$\theta = \frac{\pi}{2}$ . La valeur de l'énergie vaut donc

$$u = \frac{1}{2} \frac{U_0}{U_0} = \frac{1}{2}. \quad (2.18)$$

Cette situation est donc répulsive, mais n'est pas l'énergie minimum, ce qui suggère donc que cette configuration peut induire une réorientation des dipôles s'ils peuvent se mouvoir librement. Finalement, la situation inverse correspondrait au cas où les dipôles sont antiparallèles ( $\alpha = \pi$  et  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ). On obtient alors,

$$u = -\frac{1}{2}, \quad (2.19)$$

qui est une situation attractive. À nouveau, l'énergie n'est pas minimale, ce qui suggère une réorientation des dipôles. On constate donc que naturellement, les dipôles vont s'aligner les uns par rapport aux autres, ce à quoi nous nous attendions intuitivement. Ces quatre cas particuliers sont indiqués sur la Figure 2.2 par des cercles rouges.

## 2.3 Chaînes et anneaux

Comme nous venons de le voir, le comportement adopté par deux aimants est simple : les pôles opposés s'attirent ce qui correspond à l'alignement des dipôles. De même si l'on considère plusieurs billes, elles s'alignent et forment une chaîne qui peut ensuite se replier sur elle-même pour former un anneau [18]. De précédents travaux [19, 20, 21] ont montré qu'il est possible de déterminer analytiquement l'énergie d'une chaîne infinie, qui tend vers une valeur finie d'énergie de cohésion par nombre de billes

$$u_\infty^{\text{chaîne}} = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{2}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{(N-i)}{i^3} = -2\zeta(3) \simeq -2.404 \quad (2.20)$$

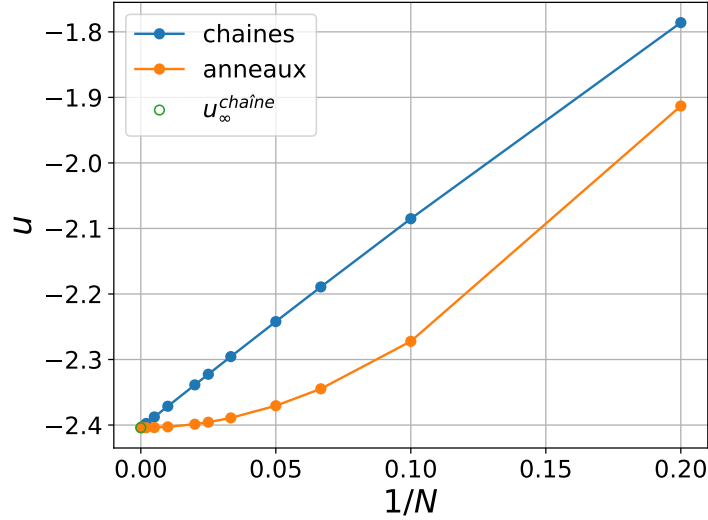


FIGURE 2.4 – Énergie en fonction de l'inverse du nombre de billes pour une chaîne (en bleu) et pour un anneau (en orange). Bien que l'énergie de cohésion des anneaux soit plus basse, on remarque que les deux structures tendent vers la même valeur asymptotique  $u_\infty^{\text{chaîne}}$  de l'énergie lorsque  $N$  tend vers l'infini.

où  $\zeta$  est la fonction zeta de Riemann [19, 21, 22]. Cette expression est assez simple étant donné que tous les dipôles sont alignés le long de la chaîne, et elle ne dépend donc que des positions relatives. Pour l'obtenir, il suffit de se donner une bille, et de calculer de proche en proche l'énergie d'interaction de cette bille avec ses voisines. De même, la valeur de l'énergie d'un anneau formé de  $N$  billes peut être déterminée analytiquement grâce à la symétrie circulaire de celui-ci [21], et vaut

$$u_N^{\text{anneau}} = -\frac{1}{4} \sin^3\left(\frac{\pi}{N}\right) \sum_{k=1}^{N-1} \frac{3 + \cos\left(\frac{2\pi k}{N}\right)}{\sin^3\left(\frac{k\pi}{N}\right)} \quad (2.21)$$

qui dépend très fortement de  $N$ . Bien que l'on puisse géométriquement assimiler un anneau à une structure 1D, car on peut la décrire à l'aide d'un seul paramètre, les billes interagissent entre elles à 2 dimensions, car l'anneau est inclus dans un plan. Ainsi, comme les billes ne sont pas dans le même alignement, on retrouve une dépendance en *sinus* et *cosinus*. De plus, lorsque  $N$  tend vers l'infini, cette valeur tend vers la valeur  $u_\infty^{\text{chaîne}}$  donnée par (2.20) car un anneau qui aurait un rayon infini devient assimilable à une chaîne infinie. Des résultats numériques sont représentés sur la Figure 2.4. Le graphique est tracé en fonction de  $1/N$  pour voir aisément ce qu'il se passe dans le cas asymptotique  $N \rightarrow \infty$ . On remarque qu'un anneau à une énergie plus faible qu'une chaîne. Cependant, il existe une barrière de potentiel



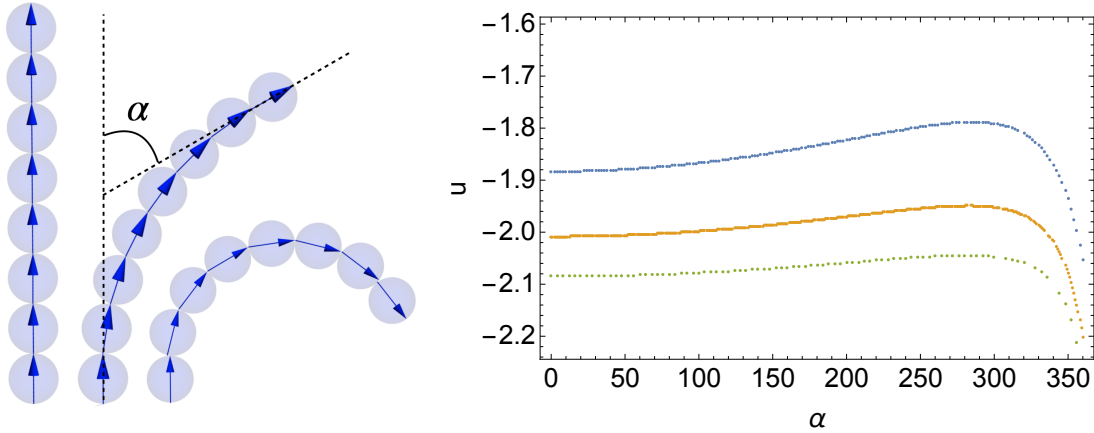


FIGURE 2.5 – Lorsque l’on replie une chaîne pour former un anneau, il faut franchir une barrière de potentiel, ce qui explique que les chaînes soient stables, car elles correspondent à un minimum local de l’énergie. **A gauche** : une illustration du replis d’une chaîne vers un anneau. **A droite** : l’énergie de chaînes de longueur  $N = 6, 8, 10$  (respectivement en bleu, orange et vert) en fonction de l’angle de replis  $\alpha$  (en degrés).

illustrée sur la Figure 2.5 entre les deux structures, expliquant pourquoi les chaînes sont stables, malgré qu’elle ne minimisent pas l’énergie [19, 23]. Ainsi, lorsque l’on plie une chaîne pour former un anneau, ce qui correspond à une augmentation de l’angle  $\alpha$  sur la figure, on augmente l’énergie et notre structure devient défavorable, produisant une force de rappel qui explique l’élasticité des chaînes. On atteint ensuite un maximum d’énergie c’est à dire le haut de notre barrière de potentiel. Si l’on continue d’augmenter l’angle  $\alpha$ , alors l’énergie va diminuer, et atteindre un nouveau minimum correspondant à un anneau. La hauteur de la barrière de potentiel diminue à mesure que  $N$  augmente. L’alignement des dipôles correspond à un minimum local de l’énergie, tandis que l’anneau correspond au minimum global.

## 2.4 Feuilletés 2D

Un anneau peut s’écraser et ainsi former une structure 2D, formée par deux chaînes adjacentes. De même, une longue chaîne peut également se replier pour former une couche. Il y a deux possibilités pour les billes de former un feuillet. On peut observer soit un réseau carré, où les dipôles sont orientés antiparallèlement comme illustré sur la gauche de la Figure 2.6, soit un réseau hexagonal, où les dipôles entre chaînes voisines sont parallèles comme sur la droite de la Figure 2.6 [18, 24]. Lorsque les dimensions du feuillet tendent vers l’infini, on trouve respectivement

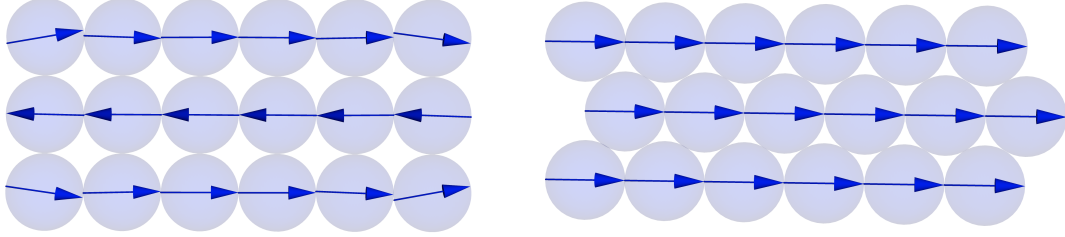


FIGURE 2.6 – À gauche : Alignement naturel des dipôles pour un réseau carré. À droite Alignement naturel des dipôles pour un réseau hexagonal.

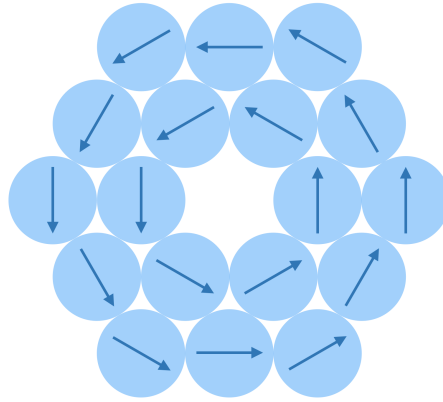


FIGURE 2.7 – Structure 2D d'un réseau hexagonal formant un polygone.

comme valeur d'énergie

$$u_{\infty}^{\text{carré}} \simeq -2.5494 \quad \text{et} \quad u_{\infty}^{\text{hexagonal}} \simeq -2.759, \quad (2.22)$$

ce qui signifie que la seconde structure est plus stable. En outre, le réseau hexagonal est plus compact que le réseau carré [24]. Pour un nombre  $N$  donné et suffisamment grand de billes (typiquement  $N > 17$ ), il est plus favorable de créer un plan qu'une boucle [25]. En effet, l'énergie d'une structure 2D hexagonale formé d'hexagones concentriques (comme illustré sur la Figure 2.7) est en réalité plus faible qu'un anneau formé du même nombre de billes [25].

## 2.5 Structures 3D

A partir de plusieurs feuillets, il devient aisé de créer une structure tridimensionnelle en superposant ceux-ci. Ainsi, on peut obtenir 3 structures différentes illustrées sur la Figure 2.8 :

- Si des feuillets carrés sont superposés de manière à ce que les dipôles soient antiparallèles, nous obtenons un réseau cubique. On peut faire une analogie

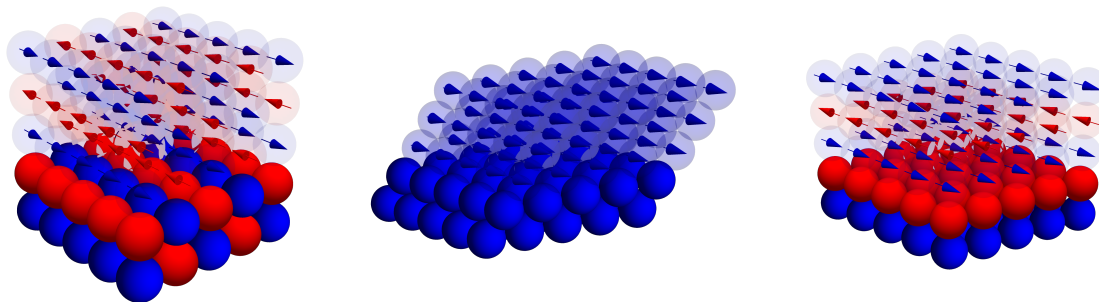


FIGURE 2.8 – De gauche à droite, illustration d’un réseau cubique, hexagonal et hybride.

entre cet arrangement et un véritable cristal qui aurait un arrangement antiferromagnétique de type C [26].

- Si des feuillets hexagonaux sont empilés de manière à ce que les dipôles soient orientés parallèlement, nous obtenons un réseau hexagonal (compact).
- Enfin, si des feuillets carrés (respectivement hexagonaux) sont superposés de manière à ce que les dipôles soient orientés parallèlement (respectivement antiparallèles), alors nous obtenons un réseau hybride. Une fois encore, une analogie peut être faite avec les cristaux antiferromagnétiques, mais cette fois, il s’agit d’un réseau hexagonal de type I [26].

Les structures hybrides sont les structures les plus stables comparativement aux deux autres [24, 27]. En effet, les valeurs asymptotiques pour des réseaux infinis valent pour un réseau cubique  $u_{\infty}^{\text{cubique}} = -2.6767$ , pour un réseau hexagonal  $u_{\infty}^{\text{hexa}} = -0.5763$  et pour un réseau hybride  $u_{\infty}^{\text{hybride}} = -2.8712$  [24]. Ce dernier minimise donc bien l’énergie, ce qui n’est pas forcément intuitif en comparaison avec le cas à 2 dimensions. Le cas hexagonal 3D est plus compact mais est pourtant le moins favorable énergétiquement. Ces résultats sont confirmés par une étude expérimentale de la déformation de magnétocristaux [27]. En effet, *Hidalgo-Caballero et al.* montrent que le réseau cubique résiste mieux à une déformation longitudinale (élongation) qu’un réseau hexagonal. Cependant, le réseau cubique a tendance à se casser sans s’allonger (fragile), ce qui est l’inverse pour le réseau hexagonal, dont les billes vont se repositionner pour allonger la chaîne. Le réseau hybride, possède les deux caractéristiques : il est résistant à la déformation mais va s’allonger [27].

Finalement, le fait de créer de longues structures, plutôt que des structures compactes abaisse l’énergie de cohésion pour un réseau hybride. C’est en effet ce qui est montré sur la Table 2.1, ou pour un même nombre de billes, un long parallépipède rectangle de réseau hybride est plus stable qu’un cube de réseau hybride. Par

dimensions	énergie de cohésion
16x2x2	-2.551399
4x4x4	-2.448587
24x2x2	-2.581854
6x4x4	-2.544033
32x2x2	-2.597131
8x4x4	-2.594021

TABLE 2.1 – Énergie de cohésion pour un réseau hybride de différentes dimensions. On remarque qu’allonger la structure est plus favorable énergétiquement.

exemple, on remarque que  $u_{16 \times 2 \times 2} < u_{4 \times 4 \times 4}$ .

## 2.6 Résumé

Nous pouvons déterminer les orientations des dipôles entre voisins en connaissant le réseau. Pour un réseau carré, les dipôles sont antiparallèles, et pour un réseau hexagonal, les dipôles sont parallèles. De plus les valeurs limites de l’énergie (lorsque les dimensions tendent vers l’infini) pour les réseaux 2D et 3D sont connues. En 2D, le réseau hexagonal est le plus compact et minimise l’énergie de cohésion. En 3D le réseau hybride est celui qui minimise l’énergie d’interaction mais n’est cependant pas le plus compact. Les différentes valeurs d’énergies de cohésion par particule  $u$  des magnétostructures sont reprises dans le Tableau 2.2 lorsque leurs dimensions tendent vers l’infini.

magnétostructure	énergie de cohésion $u$
chaîne (1D)	-2.4037
carré (2D)	-2.5494
hexagonal (2D)	-2.7585
cubique (3D)	-2.6767
hexagonal (3D)	-0.5763
hybride (3D)	-2.8712

TABLE 2.2 – Résumé des énergies de cohésion par particule de différentes magnétostructures lorsque leurs dimensions tendent vers l’infini.



# Chapitre 3

## Simulations numériques

### 3.1 Approche numérique

Afin de calculer l'énergie d'interaction entre les dipôles, nous avons créé un code en C fixant les positions et permettant de faire varier les orientations de ceux-ci afin d'obtenir les configurations les plus favorables. Voici une description de cette approche numérique.

Tout d'abord on crée une structure fixe composée de billes (par exemple un tube, une chaîne, ...). Les dipôles sont initialisés, tous dans la même direction. Ensuite les dipôles sont orientés aléatoirement. Le système est ensuite relaxé, c'est à dire que l'on va faire subir aux différents dipôles de petites variations aléatoires de leur orientation et calculer le potentiel  $u$  via l'équation (2.16), pour ensuite conserver le plus favorable c'est à dire le potentiel le plus petit [28]. Ces variations vont être de plus en plus faibles afin d'obtenir un résultat de plus en plus précis. On remarque sur la Figure 3.1 une chute brutale de l'énergie lorsque l'on diminue l'amplitude des angles que l'on fait varier aléatoirement. À la fin de ce processus, le programme aura trouvé un minimum local du potentiel, mais pas forcément le minimum global. On va donc réitérer le processus un certain nombre de fois, d'autant plus grand qu'il y a de billes et donc de minima locaux, et comparer les résultats afin d'identifier la meilleure configuration. Cette méthode s'appelle l'**annealing**. Étant donné que l'on génère des nombres pseudo-aléatoires, il est possible de trouver plusieurs fois le même résultat ou de ne pas atteindre le minimum global. Finalement, le programme génère un code *Mathematica* qui nous permet de visualiser en 3D la meilleure structure trouvée.

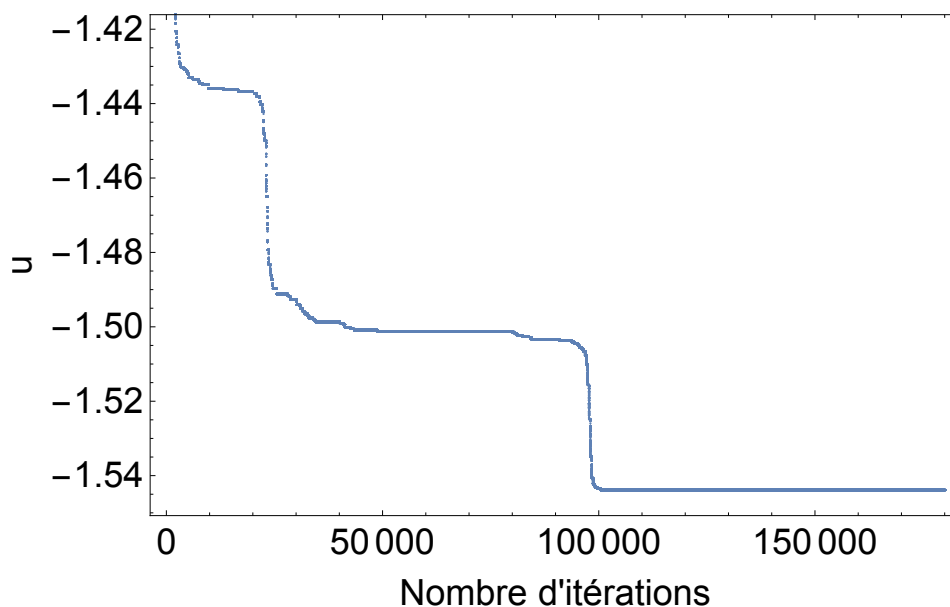


FIGURE 3.1 – Énergie d'un tube ( $6 \times 6$ ) en fonction du nombre d'itération de notre programme. Nous trouvons alors un minimum local de l'énergie. Il faut alors réitérer le processus afin de trouver le minimum global.

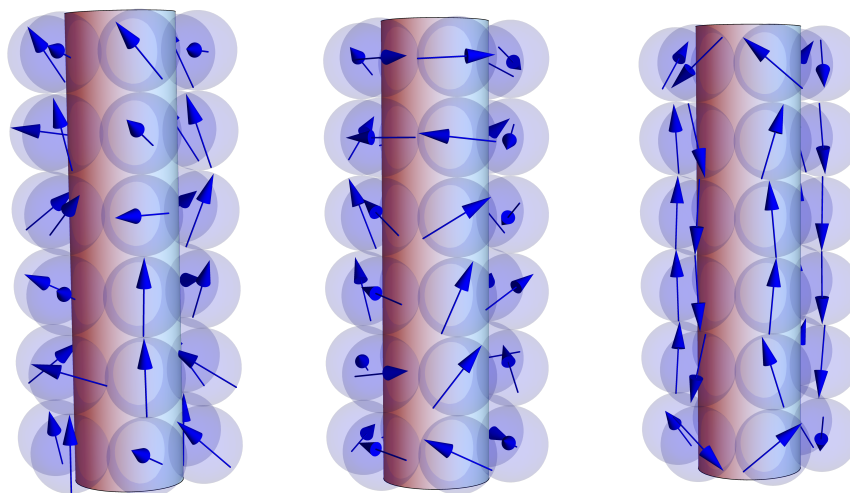


FIGURE 3.2 – De gauche à droite, orientations des dipôles à mesure que le programme relaxe le système. Au centre, le tube correspond à l'orientation trouvée sur la Figure 3.1 tandis que le tube de droite correspond au minimum global trouvé et reporté sur la Figure 4.2.

## 3.2 Puissance de calcul

Dans le calcul de la cohésion magnétique  $u$ , le nombre de paires d'interaction est  $\frac{N(N-1)}{2}$  pour  $N$  dipôles. À mesure que le nombre de billes du système augmente, le temps de calcul augmente d'autant plus, ce qui nous amène à de très longues simulations. Afin de palier à ce problème, nous avons implémenté le module OpenMPI qui permet de faire fonctionner le programme sur plusieurs coeurs de l'ordinateur simultanément pour partager la charge de travail, et nous avons effectué les simulations sur les super-ordinateurs du CÉCI<sup>1</sup>(en particulier *Lemaître 3*, *NIC4* et *NIC5*)[29, 30, 31]. Ainsi, nous pouvions effectuer jusqu'à 1024 relaxations en parallèle au lieu d'une seule sans l'implémentation d'OpenMPI. Étant donné que les processus fonctionnent en parallèle, ils communiquent entre eux afin de comparer les résultats, et ne conservent que le meilleur d'entre eux. La Figure 3.3 montre que le temps de simulation est significativement réduit si l'on utilise plus d'un processeur. Cependant, cette vitesse atteint une limite. En effet, nous effectuons un certain nombre  $N$  de calculs en parallèle, et il est donc inutile de demander plus de  $N$  processeurs, car ils passent plus de temps à communiquer entre eux qu'à calculer, ce qui devient contre productif. Ce nombre  $N$  limite donc notre efficacité. On remarque cependant que le gain (ou *speed up*), défini par

$$S = \frac{t_1}{t_p},$$

ou  $t_1$  est le temps nécessaire pour effectuer le programme avec 1 processeur, et  $t_p$  le temps nécessaire pour effectuer le programme avec  $p$  processeurs [30], peut atteindre des valeurs importantes, jusqu'à 86 sur la Figure 3.3 avec 96 processeurs. Le comportement de celui-ci n'est donc pas tout à fait linéaire.

## 3.3 Résumé

Pour résumer, nous cherchons numériquement les orientations de chaque dipôle minimisant l'énergie d'interaction dans une structure donnée. Pour accélérer les calculs, nous effectuons des simulations massives sur un super-calculateur en répartissant la charge de travail sur plusieurs coeurs. Les résultats obtenus peuvent ensuite être visualisés en 3D grâce à *Mathematica*.

---

1. Consortium des Équipements de Calcul Intensif.



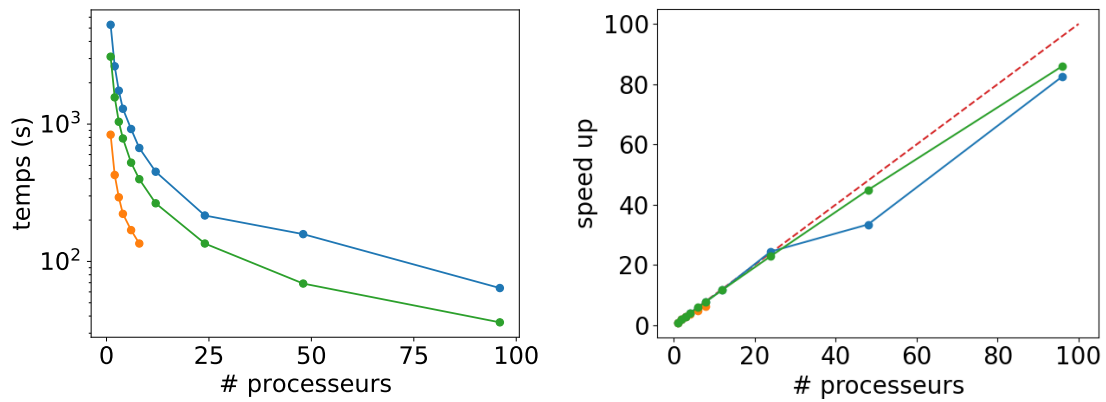


FIGURE 3.3 – **A gauche** : Temps nécessaire pour effectuer une simulation d'un magnétotube de  $(6 \times 4)$  billes en fonction du nombre de processeurs pour le cluster Lemaitre 3 (processeurs Intel<sup>®</sup> Xeon<sup>®</sup> Gold 5118) en bleu, pour le cluster NIC5 (processeurs AMD<sup>®</sup> Epyc<sup>®</sup> Rome 7542) en vert et pour un processeur Intel<sup>®</sup> Core<sup>®</sup> I9 9980H en jaune.

**A droite** : Speed up (Gain) en fonction du nombre de processeur. En pointillé rouge, la fonction linéaire  $f(x) = x$  attendue dans le cas idéal. Pour le reste, le même code couleur est employé.

# Chapitre 4

## Magnétotubes

### 4.1 Description d'un magnétotube

Nous avons vu précédemment qu'il est possible de créer une grande variété de magnétostructures. Si certaines d'entre elles ont la forme d'un tube, nous les appellerons simplement magnétotubes. Pour en créer un, nous allons tout d'abord créer un anneau, dont les dipôles s'orientent les uns derrière les autres, comme sur la Figure 2.3b. Nous allons définir le nombre  $l$  comme le nombre de billes formant un anneau. Ensuite, on peut empiler plusieurs anneaux afin de former un tube, et ce de manière à obtenir un réseau carré comme sur la gauche de la Figure 4.1 ou hexagonal comme sur la droite de la Figure 4.1, selon que les dipôles entre anneaux voisins soient respectivement antiparallèles ou parallèles. Le nombre  $m$  est alors le nombre d'anneaux empilés. Un tube va donc être décrit par ces deux nombres ( $l \times m$ ). Dans les sections suivantes, nous allons étudier l'influence de la forme d'un tube sur son énergie d'interaction.

### 4.2 Empilement carré

#### 4.2.1 $l$ pair

Dans un premier temps, intéressons-nous aux tubes avec un nombre  $l$  **pair** de billes le long des anneaux, et avec un **empilement carré** des billes, comme illustré sur la gauche de la Figure 4.1. Pour un nombre  $l$  fixé, faisons varier la hauteur  $m$  du tube. Lorsque  $m = 1$ , nous sommes simplement en présence d'un anneau, et nous avons vu ce cas au chapitre 2. Les dipôles s'orientent les uns derrière les autres et forment une boucle. Lorsque ces anneaux sont empilés antiparallèlement dans le but

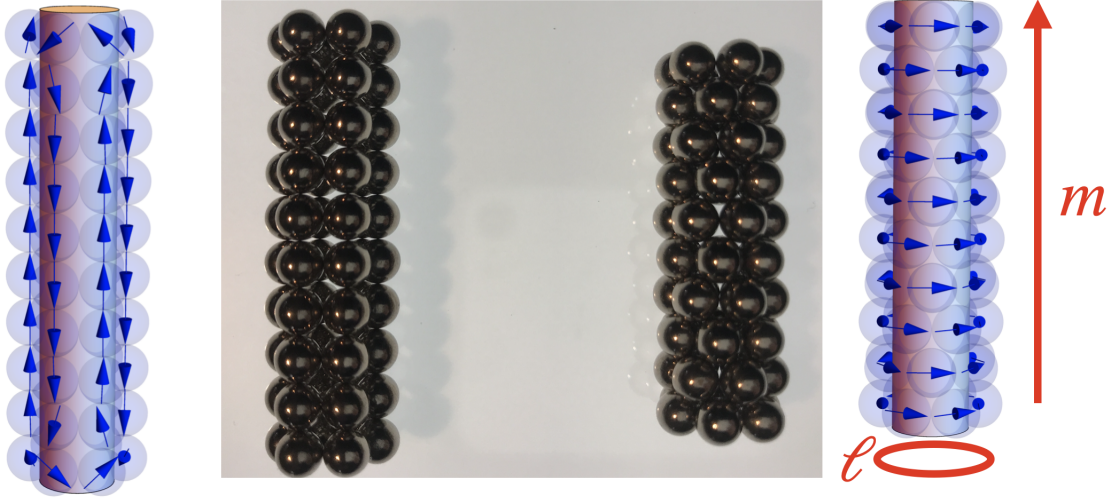


FIGURE 4.1 – Un magnétotube peut être décrit par deux nombres :  $l$  est le nombre de billes formant un anneau (ici  $l = 6$ ), et  $m$  est le nombre d’anneaux empilés (ici  $m = 10$ ). On peut empiler les anneaux de manière à créer des tubes dont le réseau est soit (a) carré ou soit (b) hexagonal.

de créer un réseau carré, on s’attend à voir les dipôles formant le tube s’orienter selon des boucles alternées entre anneaux voisins. C’est effectivement le résultat obtenu et illustré sur la Figure 4.2. Une fois de plus, l’énergie est représentée en fonction de  $1/m$  dans le but de faire apparaître sur le graphique la tendance de l’énergie quand  $m$  tend vers l’infini. Cependant, les simulations effectuées (en bleu sur la Figure 4.2) montrent qu’à partir d’une certaine hauteur, il existe une transition au-delà de laquelle les dipôles se réorientent parallèlement à l’axe du tube, en effectuant une rotation de  $\pm 90^\circ$ . Dans cette nouvelle configuration l’énergie est encore plus basse que précédemment rendant la structure plus stable. On distingue alors deux zones séparées par une transition. Néanmoins, tous les dipôles n’effectuent pas une rotation de  $\pm 90^\circ$  lors de cette transition. En effet, sur la Figure 4.2 sont représentés deux cas limites en cercles ouverts où les orientations des dipôles sont fixées : celui où les dipôles forment des boucles (orange) et celui où ils forment des chaînes le long de l’axe du tube (vert). Or, le résultat de nos simulations (bleu) sont différents de ce dernier cas. On remarque que les dipôles situés aux extrémités du tube ne sont pas parfaitement orientés le long de son axe. Ces effets de bord réduisent donc davantage l’énergie par rapport au cas limite. Cet écart d’énergie entre le cas où les orientations sont fixées et le cas où les dipôles sont relaxés diminue à mesure que la hauteur du tube augmente. En effet, notre énergie  $u$  est normalisée par le nombre de billes, au plus ce nombre augmente avec la hauteur, au moins les effets de bords apporteront leur contribution à l’énergie de cohésion. Autrement dit, les effets de

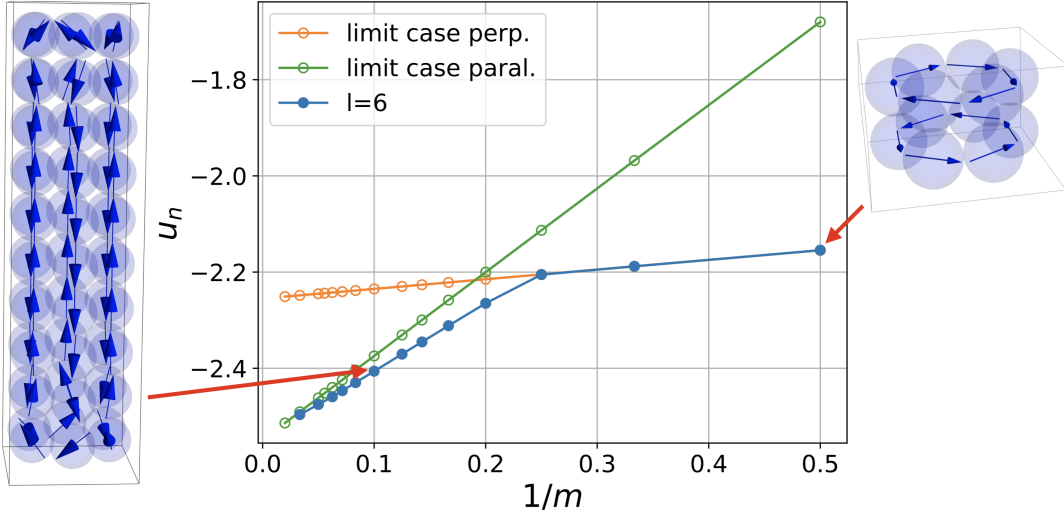


FIGURE 4.2 – Résultats numériques des orientations des dipôles en fonction de l’inverse de la hauteur du tube ( $6 \times m$ ) de réseau carré (en bleu). Lorsque  $m$  est petit, les dipôles s’orientent selon des boucles. Lorsque  $m$  est grand, les dipôles forment des chaînes le long de l’axe du tube. Les deux cas limites correspondent respectivement au cas où les dipôles forment des boucles autour de l’axe du tube (en orange) et au cas où les dipôles forment des chaînes orientées le long de l’axe du tube (en vert). Le cas simulé (bleu) diffère du cas limite vert à cause des effets de bords que l’on distingue sur la représentation 3D à gauche de la Figure.

bord auront une contribution moyenne de moins en moins importante à mesure que le tube croît.

Nous venons d’observer les orientations des dipôles lorsque l’on fixe  $l$  et que l’on fait varier la hauteur  $m$ . Nous sommes en droit de nous demander quelle influence a le périmètre  $l$  du tube sur l’énergie. Lorsque  $l$  augmente, comme c’est le cas sur la Figure 4.3, la hauteur  $m$  à laquelle est prédite la réorientation des dipôles augmente également. À  $m$  fixé, augmenter  $l$  diminue également l’énergie. Lorsque les dimensions  $l$  et  $m$  du tube tendent vers l’infini, notre tube devient assimilable à un plan carré infini dont la valeur de l’énergie de cohésion magnétique est connue et vaut :  $u_{\infty}^{\text{carré}} \simeq -2.5494$ .

#### 4.2.2 $l$ impair

En choisissant un nombre impair de billes formant un anneau, nous allons également observer deux comportements. Pour les petits tubes ( $m$  petit) il n’y a pas de différence par rapport au cas  $l$  pair. Les dipôles s’orientent les uns derrière les autres

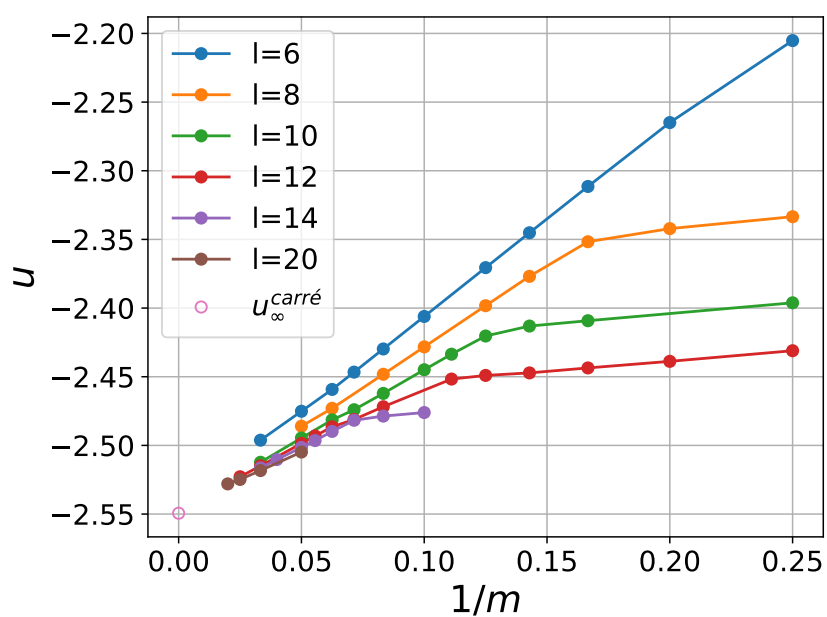


FIGURE 4.3 – Cohésion magnétique  $u$  de magnétotubes à réseau carré en fonction de l'inverse de la hauteur  $m$  du tube, pour différents diamètres de tubes,  $l$  étant pair. Les différentes courbes tendent vers la valeur asymptotique d'un plan infini  $u_{\infty}^{\text{carré}} \simeq -2.5494$  indiquée par le cercle rose.

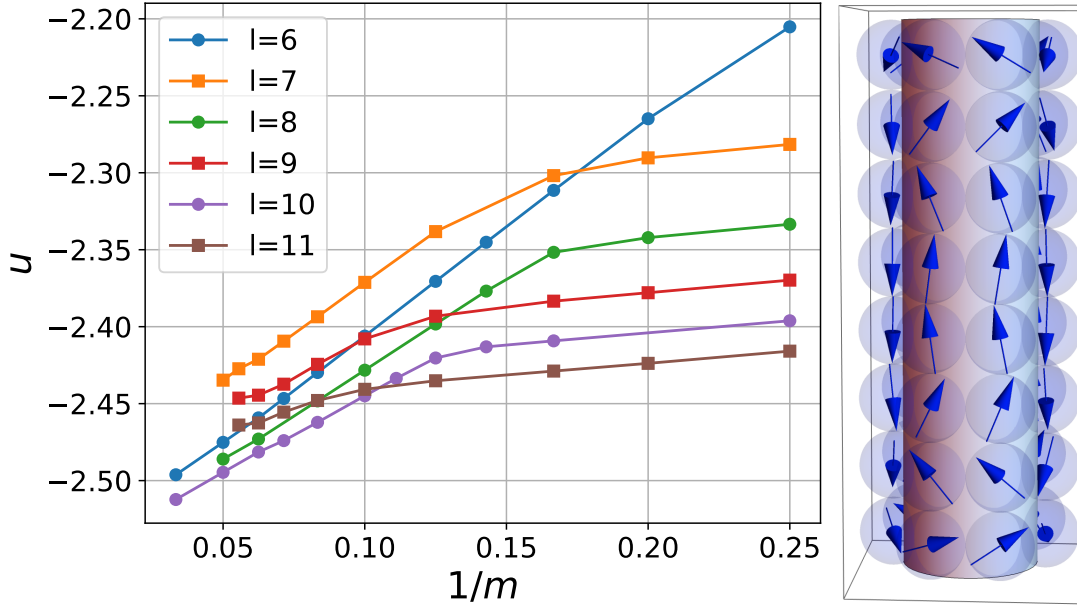


FIGURE 4.4 – Énergie réduite  $u$  des tubes carré en fonction de l'inverse de la hauteur  $1/m$  pour des tubes de différents diamètres. À droite, un tube  $(7 \times 8)$ . On y voit deux chaînes dont les dipôles sont presque parallèles, ce qui frustre le système et réduit considérablement l'énergie de cohésion magnétique.

formant de petites boucles. En revanche, lorsque  $m$  devient grand les dipôles se réorientent antiparallèlement le long de l'axe du tube, formant également des chaînes en alternance antiparallèle pour conserver un réseau carré. Cependant, étant donné que  $l$  est impair une chaîne entière doit obligatoirement être parallèle à l'une des ses voisines ce qui frustre le système. Les chaînes parallèles peuvent adopter deux orientations différentes qui conduisent le système à deux situations énergiquement similaires. Ces deux orientations engendrent une augmentation de l'énergie par rapport au cas idéal où les chaînes voisines sont antiparallèles. Ce résultat est présenté à la Figure 4.4.

Cette augmentation d'énergie de cohésion ne s'estompe pas à mesure que  $m$  augmente, car la chaîne frustrée augmente en longueur également. En d'autres termes, même lorsque la hauteur du tube tend vers l'infini, l'énergie d'un tube  $l$  sera plus grande qu'un tube  $l - 1$  ( $l$  étant impair). Cependant, c'est à mesure que  $l$  augmente que cette frustration va s'estomper. Cela semble logique étant donné qu'à mesure que le diamètre du tube augmente, la proportion de l'énergie de la seule chaîne frustrée par rapport à toutes les autres chaînes antiparallèles devient proportionnellement plus petite. Inversement, lorsque l'on fixe  $m$  et que l'on augmente  $l$ , on remarque

que la différence d'énergie avec un tube qui aurait  $l - 1$  billes de circonférence diminue. C'est par exemple le cas sur la Figure 4.4. Regardons en  $m = 12$ , c'est à dire les points situés juste à gauche de  $1/m = 0.10$ . On remarque que la différence d'énergie entre le carré orange correspondant à  $l = 7$ , et le point bleu  $l = 6$  est supérieure à la différence d'énergie entre le carré rouge  $l = 9$  et le point vert  $l = 8$ , elle même supérieure à la différence  $l = 11$  et  $l = 10$ . Ces différences d'énergies valent respectivement

$$\begin{aligned} u_{7 \times 12} - u_{6 \times 12} &= 0.036196, \\ u_{9 \times 12} - u_{8 \times 12} &= 0.023756, \\ u_{11 \times 12} - u_{10 \times 12} &= 0.014193. \end{aligned} \tag{4.1}$$

L'augmentation de la cohésion magnétique due à la frustration s'estompe donc lorsque  $l$  augmente car en moyenne, la contribution défavorable de la frustration diminue.

### 4.3 Empilement hexagonal

On rappelle que dans ce genre de configuration où les anneaux sont empilés de manière hexagonale, comme représenté sur la droite de la Figure 4.1, les dipôles sont orientés dans le même sens, le long des anneaux. Étant donnée que les dipôles voisins sont orientés dans la même direction, il n'y a dès lors pas lieu de distinguer entre  $l$  pair et impair puisqu'il n'y a plus de frustration des aimants. Lorsque les dimensions du tube tendent vers l'infini, on peut connaître analytiquement la valeur de l'énergie réduite, qui devient celle d'un plan infini  $u_{\infty}^{\text{hexagonal}} \simeq -2.759$  [21, 32].

La Figure 4.5 montre les résultats de l'énergie en fonction de l'inverse de la hauteur, obtenus numériquement pour différents tubes. On observe une transition dans l'orientation des dipôles comme dans le cas d'un réseau carré. Cependant, cette transition apparaît dans le cas hexagonal pour des tubes beaucoup plus longs que dans le cas carré. On observe bien sur la figure la valeur asymptotique  $u_{\infty}^{\text{hexagonal}}$  représentée par le cercle rose.

### 4.4 Résumé

Dans un magnétotube, on constate que les dipôles peuvent adopter deux orientations préférentielles. Lorsque le tube est court, les dipôles des anneaux forment des boucles. Le cas d'un tube long amène les dipôles à s'orienter en formant des chaînes parallèlement à l'axe du tube. Cette transition a lieu pour des tubes plus longs pour un réseau hexagonal que pour un réseau carré. De même, plus le tube est large, plus cette transition apparaît pour des tubes longs. Dans le cas particulier où le réseau

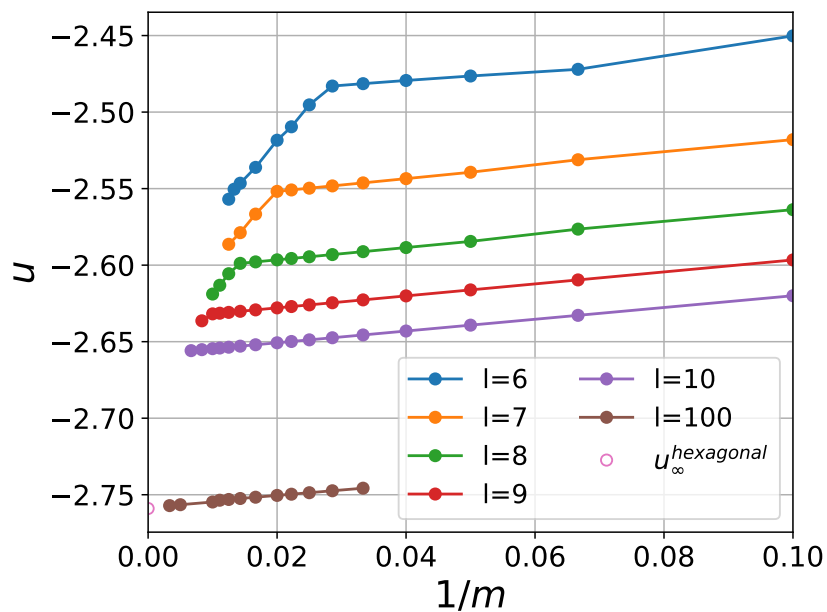


FIGURE 4.5 – Énergie réduite des tubes hexagonaux en fonction de l'inverse de la hauteur  $1/m$ .

est carré et le nombre de billes formant un anneau est impair, une des chaîne va inévitablement devoir être dans la même orientation que l'une de ses voisine ce qui aura pour conséquence une augmentation de l'énergie à cause de la frustration.





# Chapitre 5

## Réorientation des dipôles

### 5.1 Objectifs du chapitre

Nous avons vu dans le chapitre précédent que les dipôles s'orientaient préférentiellement afin de minimiser l'énergie d'interaction. En plus d'une transition dans la réorientation, on peut observer de la métastabilité dans les structures tubulaires **de réseau carré**. En agissant délicatement, on peut créer des tubes qui soient longs et fins, et dont les dipôles forment des anneaux. Mais il suffit d'une petite perturbation pour que la transition s'effectue et que les dipôles s'orientent le long de l'axe du tube. À mesure que l'on augmente la hauteur, la barrière de potentiel entre les deux configurations diminue, jusqu'à ce qu'une simple perturbation fasse verser le système d'un puits à l'autre. La Figure 5.1 illustre ce phénomène. Faisons abstraction des effets de bords qui apparaissent lorsque l'on relaxe le système (en bleu) pour expliquer ce phénomène sur base des cas limites, où l'on fixe les orientations des dipôles (en orange et vert). Lorsque la hauteur est petite, on se trouve sur la droite orange, et à mesure que  $m$  augmente ( $1/m$  diminue) on s'approche du point de transition où l'on devrait théoriquement continuer sur la droite verte car elle minimise l'énergie. Or il est possible expérimentalement de se trouver sur la droite orange bien que les simulations prédisent que la structure favorable soit la droite verte. Le système est dit **métastable**. Le système est également métastable vis-à-vis de sa forme géométrique. Il peut s'écraser sur lui même pour former un parallélépipède rectangle de réseau cubique (en rouge), si  $l$  est pair, ce qui est encore plus favorable énergétiquement.

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à ce phénomène de métastabilité **pour le réseau carré**. Nous allons également étudier la dynamique de réorientation des dipôles, ainsi que les frottements entre les billes, qui joueront un rôle défavorable

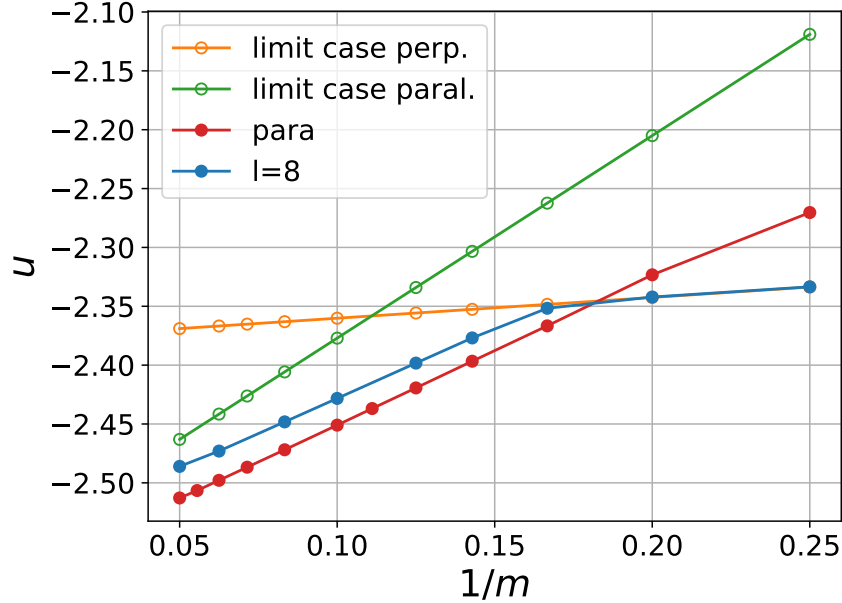


FIGURE 5.1 – Résultats numériques de l'énergie d'un tube  $l = 8$  et d'un parallélépipède rectangle de réseau cubique correspondant à l'écrasement du tube, en fonction de l'inverse de la hauteur.

à la réorganisation.

## 5.2 Réorientation des dipôles

Les simulations prédisent qu'à partir d'une certaine hauteur  $m_c$  critique dépendante de  $l$ , les dipôles dans un tube se réorientent le long de son axe. Cette transition se traduit par une diminution de l'énergie de cohésion. Cependant, on peut expérimentalement former un tube qui ait une hauteur supérieure à  $m_c$  dont les dipôles forment de petites boucles. En d'autres mots, on peut se situer sur la droite métastable (orange) de la Figure 5.1, alors que la droite bleue est énergétiquement plus favorable lorsque  $m$  est grand. Lorsque l'on perturbe un peu le tube, par exemple en faisant rouler les billes entre les doigts, on déclenche une réorientation des dipôles et le système se trouve alors dans une configuration de plus basse énergie.

### 5.2.1 Étude expérimentale de la réorientation

Pour étudier expérimentalement la transition dans la réorientation des dipôles, nous allons préparer un tube de hauteur  $m$  dans l'état métastable. Nous allons

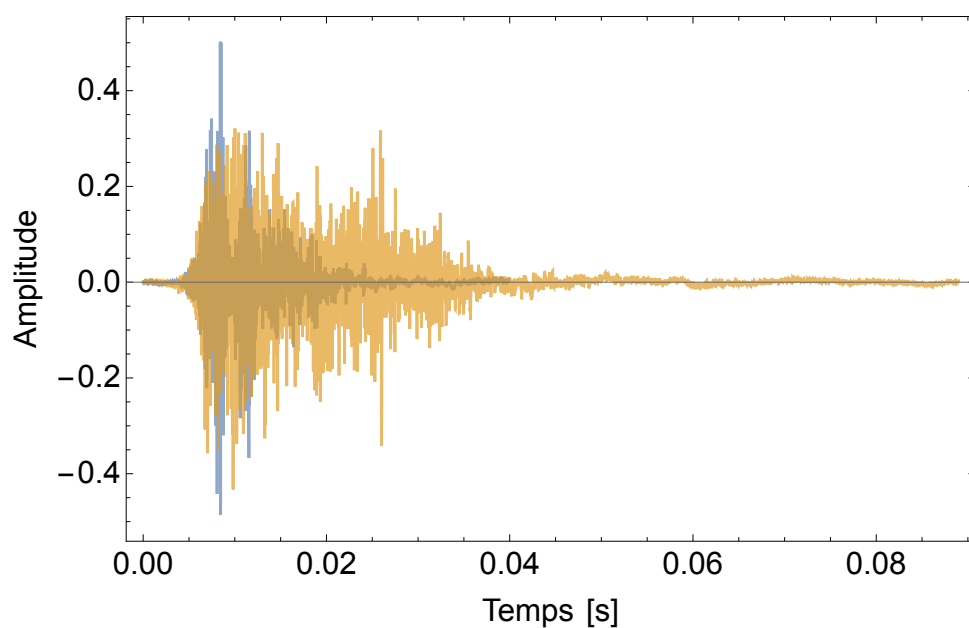


FIGURE 5.2 – Échantillon sonore enregistré lors d’une transition. En bleu, un tube  $(6 \times 12)$  et en orange, un tube  $(6 \times 60)$ . Comme attendu, le long tube met plus de temps à se réorienter que le tube court. L’amplitude de l’échantillonnage sonore est en unités arbitraires.

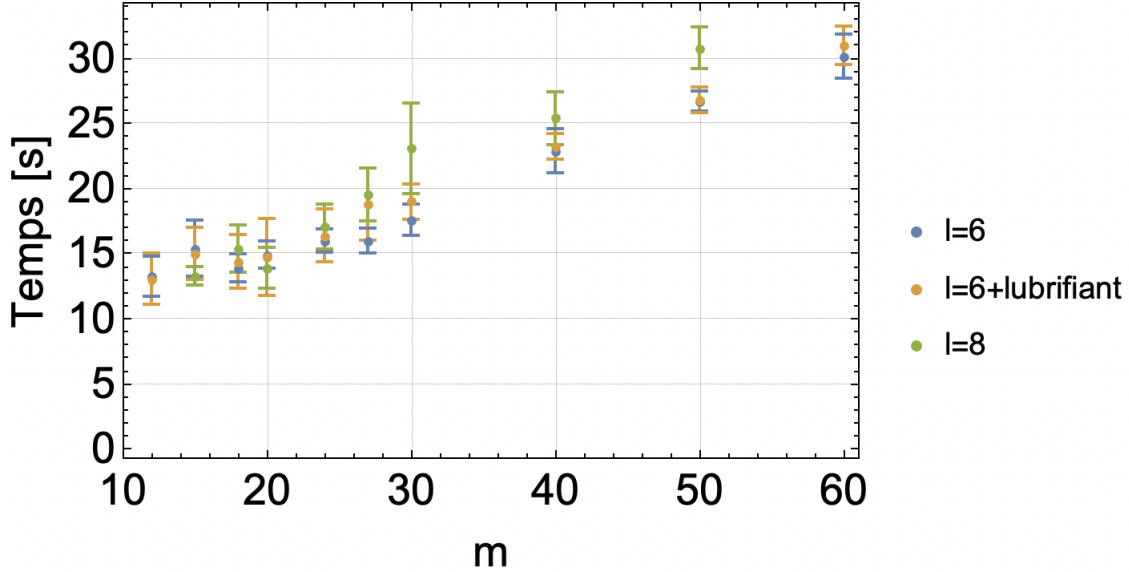


FIGURE 5.3 – Temps de transition (Temps moyen sur un échantillon de 10 transitions, la barre d'erreur représente l'écart type de l'échantillon) dans l'orientation des dipôles de tubes, en fonction de la hauteur  $m$ . Nous avons ajouté de l'huile silicone 50 cts sur une tube  $l = 6$  afin de réduire les frottements.

ensuite perturber l'une des extrémités en faisant rouler les billes entre les doigts afin de changer leurs orientations. Lors de cette transition, un son est émis à cause du frottement des billes les unes contre les autres. Nous enregistrons alors avec un microphone le crissement émis par la structure lors de la transition. Grâce au logiciel *Audacity*, on mesure le temps que fait l'échantillon sonore de la transition. Les données brutes de ces échantillons peuvent être exportées pour ensuite être portées en graphique, comme l'illustre la Figure 5.2. Nous y avons superposé deux échantillons afin de montrer qu'un tube ( $6 \times 60$ ) (en orange) met plus de temps à effectuer une transition qu'un tube ( $6 \times 12$ ) (en bleu). On répète ce processus une dizaine de fois dans le but d'avoir un échantillon de données pour calculer une moyenne et un écart-type, et ce, pour plusieurs hauteurs de tubes. Les résultats sont présentés sur la Figure 5.3. On y voit le temps de transition d'un tube en fonction de sa hauteur. Le temps mesuré est supérieur pour de longs tubes que pour des tubes courts ce qui est assez intuitif. En effet, plus le tube est long, plus la perturbation va mettre de temps à se propager jusqu'à l'autre extrémité. On remarque néanmoins pour les tubes courts une sorte de plateau, correspondant à la réorientation des dipôles lors de la perturbation, autrement dit, d'un seul dipôle. Pour des tubes plus larges, le temps de transition semble être plus important. Nous avons également ajouté du lubrifiant sur les billes, pour diminuer les frottements, mais les résultats sont similaires aux

résultats obtenus sans lubrification. Cependant, il serait intéressant de refaire la manipulation avec un dispositif calibré pour l'intensité sonore qui nous permettrait de comparer l'amplitude des échantillons afin de comparer des tubes lubrifiés et non lubrifiés.

### 5.2.2 Étude numérique de la réorientation

Nous venons de voir expérimentalement qu'un long tube met plus de temps lors de la réorientation des dipôles qu'un tube court, car la perturbation doit se propager d'une extrémité à une autre. Nous avons dès lors simplement modélisé cette perturbation par un front de réorientation qui se propagerait de proche en proche, c'est à dire d'anneau en anneau, le long du tube. Nous avons ensuite calculé l'énergie  $u$  du tube à mesure que le front se propage, pour différentes tailles de tubes. Nous avons appelé  $m_t$  le nombre d'anneaux s'étant réorienté. Comme représenté sur les Figure 5.4, lorsque le premier anneau se réoriente ( $m_t = 1$ ), l'énergie du tube augmente et correspond à un maximum. Ce qui signifie que le système est instable, et va chercher à réorienter les dipôles pour atteindre un des minima. Lorsque l'on propage le front, l'énergie diminue jusqu'à un nouveau minimum. Dans le cas d'un tube court, par exemple un tube de longueur inférieure à  $m = 6$  sur la Figure 5.4, le minimum global se trouve en  $m_t = 0$ . Cela signifie donc que la perturbation initialement en  $m_t = 1$  ne va pas se propager, et le système va revenir à son état initial, à savoir les dipôles formant des boucles. Dans le cas d'un long tube, le minimum se trouve en  $m_t = m$ , la longueur du tube. Dès lors la perturbation peut se propager le long du tube, jusqu'à ce que tous les dipôles se soient réorientés. On retrouve donc bien ce comportement métastable lorsqu'un tube est long. Une perturbation localisée à une extrémité va permettre aux dipôles de se réorienter jusqu'à une transition complète du tube. Nous avons illustré la progression d'un front sur la Figure 5.5 pour un tube ( $6 \times 7$ ).

## 5.3 Écrasement du magnétotube

Intéressons-nous au cas où le magnétotube change complètement de structure géométrique, autrement dit lorsqu'il s'écrase pour devenir un parallélépipède rectangle. Ce phénomène est métastable vis-à-vis de la hauteur de la structure. Insistons encore une fois sur le fait que nous sommes initialement en présence d'un magnétotube de réseau carré, avec  $l$  pair.

Nous avons tracé le paysage énergétique d'un tube composé de 8 billes de circonférence ( $l = 8$ ), en fonction de l'écrasement  $\theta$  de celui-ci, pour plusieurs hauteurs  $m$  de tube à la Figure 5.6. L'angle  $\theta$  est l'angle entre deux billes particulière illus-

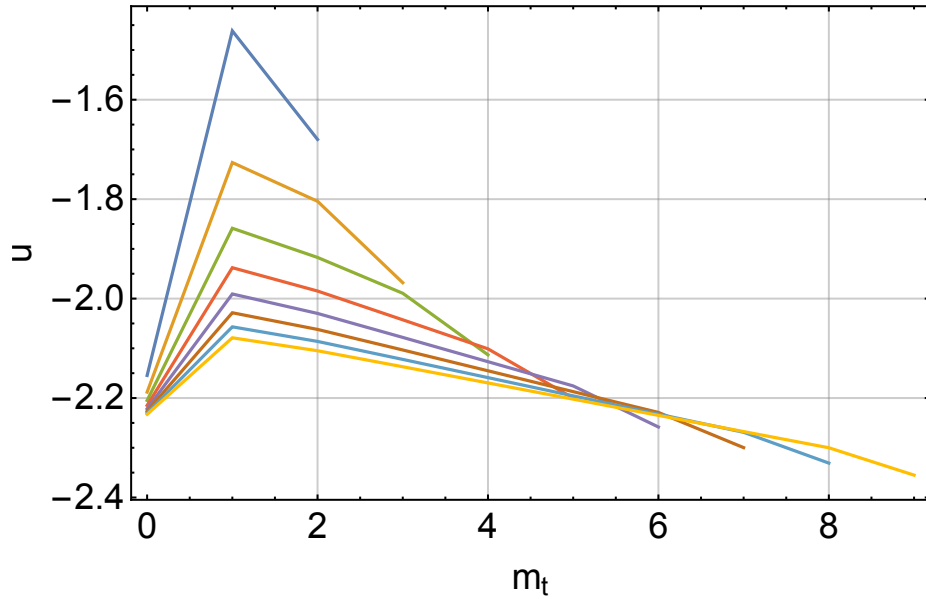


FIGURE 5.4 – Énergie pour des tubes  $l = 6$  et différentes hauteurs  $m$  (de  $m = 2$  à 9 de haut en bas) en fonction du nombre  $m_t$  d’anneaux ayant réorientés leurs dipôles le long de l’axe du tube. Lorsque le tube est dans son état initial  $m_t = 0$ , c’est à dire que tous les dipôles forment des boucles, le fait que les premiers dipôles aux extrémités se réorientent va augmenter l’énergie. Ensuite la réorientation successive des autres anneaux ne fait que diminuer l’énergie. On remarque encore un fois que lorsque  $m$  est petit, le front ne va pas se propager car l’énergie finale, c’est à dire lorsque le front s’est propagé et que tous les dipôles sont le long de l’axe est supérieure à l’énergie initiale.

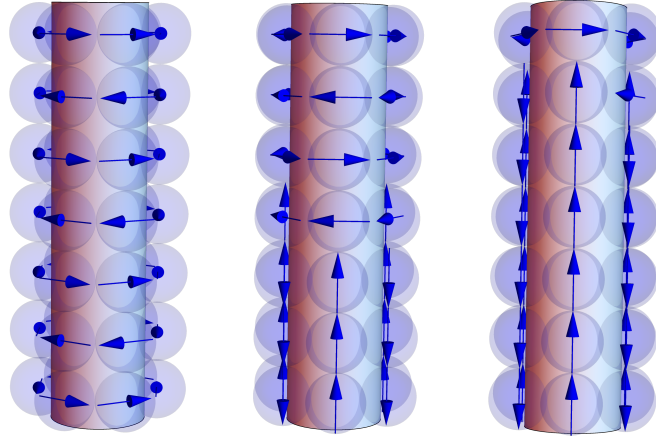


FIGURE 5.5 – Front de transition au sein d’un tube  $(6 \times 7)$ . À gauche, la transition n’a pas eu lieu et  $m_t = 0$ . Au centre, 3 anneaux ont effectués leur transition et  $m_t = 3$ . Enfin, à droite, 6 anneaux ont effectués leur transition et  $m_t = 6$ .

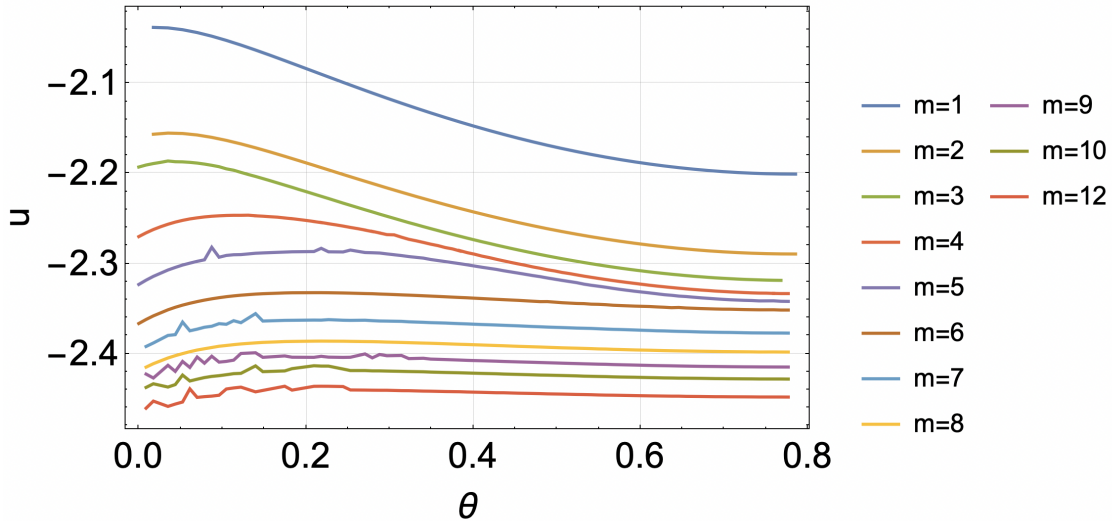


FIGURE 5.6 – Paysage énergétique de la transition entre structure tubulaire  $8 \times m$  et parallélépipède rectangle  $4 \times 2 \times m$ . Les différentes courbes correspondent à différentes hauteurs  $m$ . Les petites imprécisions sont dues au fait que la simulation n’a probablement pas convergé vers le minimum d’énergie attendu. De plus longues simulations sont nécessaires. Les courbes d’énergies plus élevées correspondent à des hauteurs plus petites et vice versa.



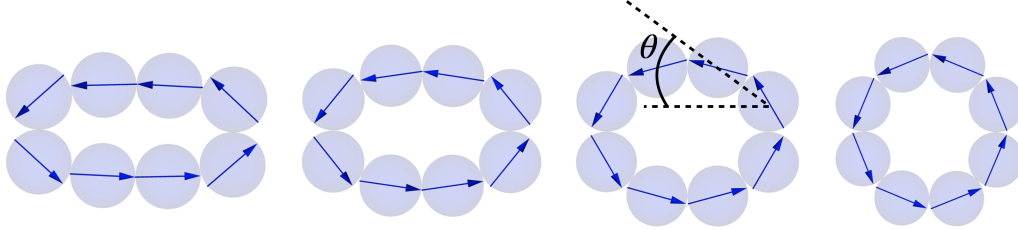


FIGURE 5.7 – **De gauche à droite** : un anneau ( $m = 1$ ) qui passe d'un état parallélépipède à un état tube. Comme sur la Figure 5.6, l'angle  $\theta$  représenté correspond à l'écrasement du tube. Un angle  $\theta = 0$  correspond à un parallélépipède et un angle  $\theta = \frac{\pi}{4}$  correspond à un tube cylindrique.

trées sur la Figure 5.7. Lorsqu'il vaut  $\frac{\pi}{4}$ , nous avons un anneau, lorsqu'il vaut 0, nous avons un parallélépipède, et si sa valeur est comprise entre ces deux cas, nous avons un tube déformé. On remarquera que pour  $m = 1$ , c'est à dire un simple anneau, il n'y a pas véritablement de barrière de potentiel. Le minimum d'énergie correspond à un anneau "circulaire". Si on écrase le tube, c'est à dire que l'on va déformer l'anneau en une ellipse comme sur la Figure 5.7, l'énergie augmente jusqu'à un maximum correspondant à la situation d'un parallélépipède. Cette situation est instable lorsque  $m = 1$ . Cependant, lorsqu'on augmente la hauteur du tube, apparaît une barrière de potentiel, simplement grâce au potentiel d'interaction. A mesure que la hauteur du tube augmente, la hauteur de la barrière diminue, et le minimum local correspondant au parallélépipède diminue, jusqu'à devenir le minimum global. La présence d'un barrière de potentiel induit une métastabilité telle qu'observée à la fois dans les simulations et les expériences réalisées, car si le système n'a pas suffisamment d'énergie pour passer outre la barrière, le système reste bloqué dans son minimum local, et il n'y a pas de transition. De plus, cette barrière nous renseigne directement sur la déformation que peut subir le tube si on l'écrase. Tout comme le cas d'une chaîne que l'on peut replier en un anneau vu au chapitre 2, la barrière de potentiel explique l'élasticité d'un tube court lorsque l'on veut l'écraser. Les tubes courts résistent mieux à ce type de déformation que les tubes longs.

## 5.4 Forces de frottement

Précédemment, nous avons remarqué que lorsqu'un tube effectuait une réorientation, il émettait un crissement. Nous avons alors enregistré ce son afin d'estimer le temps que prenait un tube pour se réorienter. Si lors de la réorientation, les billes effectuaient un mouvement de roulement sans glissement, nous ne devrions pas entendre de bruit, ce qui suggère alors que la dynamique de réorientation des dipôles

fait intervenir du glissement et donc des frottement. Nous allons donc tenter de comprendre comment les forces de frottement agissent sur nos billes. Tout d'abord, la force conservative agissant entre deux billes dérive du potentiel (2.16) et vaut

$$u = \frac{1}{2} [\cos(\alpha) - 3 \cos(\theta) \cos(\alpha - \theta)] \quad (5.1)$$

ou  $\alpha$  est l'angle entre les deux dipôles, et  $\theta$  l'angle entre les deux billes (voir Figure 2.14). Ainsi, la force entre les deux billes vaut en coordonnées polaires

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}u = -\frac{\partial u}{\partial r} \hat{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} \hat{\theta}, \quad (5.2)$$

en considérant  $\alpha$  comme une fonction de  $\theta$  afin de minimiser le potentiel. Nous allons uniquement nous intéresser à la composante de la force selon  $r$  ( $F_r$ ) car la force normale y est égale en norme, si les billes sont en contact et le signe négatif (force attractive). Cette force vaut

$$F_r = \frac{3\mu_0 m_1 m_2}{4\pi r_{12}^4} [\cos(\alpha) - 3 \cos(\theta) \cos(\alpha - \theta)], \quad (5.3)$$

et la force de frottement vaut,

$$\begin{aligned} |F_f| &= \mu |F_r| & \text{si} & & F_r < 0, \\ F_f &= 0 & \text{sinon} & & \end{aligned} \quad (5.4)$$

avec  $\mu$  le coefficient de frottement. De la même manière que nous avons normalisé le potentiel, nous allons normaliser la force  $F_r$  par un coefficient (correspondant à la force entre deux billes cotes à cotes dont les dipôles sont orientés dans la même direction -  $\alpha = 0$  et  $\theta = 0$ ) et le nombre de billes. La force réduite 5.3 devient donc

$$f = \frac{\mu}{2} [\cos(\alpha) - 3 \cos(\theta) \cos(\alpha - \theta)] \quad (5.5)$$

Ainsi, en intégrant cette force sur un chemin, nous obtiendront le travail des forces de frottement. Estimons tout d'abord le travail des forces de frottement dans le cas simple ou  $\alpha = 0$ . Nous regarderons ensuite pour la fonction  $\alpha(\theta)$  qui minimise l'énergie d'interaction.

#### 5.4.1 Cas simple : $\alpha = 0$

Lorsque  $\alpha = 0$ , les dipôles restent orientés dans la même direction. Seule leur position relative change. On peut choisir deux chemins, comme illustré sur la Figure 5.8 : On part de la configuration de plus haute énergie vers la configuration de

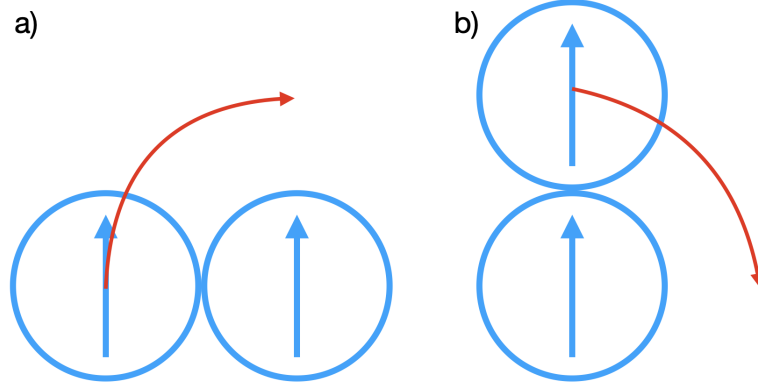


FIGURE 5.8 – Deux chemins différents pour le déplacement d’une bille. a) Configuration de haute énergie vers configuration de basse énergie. b) Configuration de basse énergie vers configuration de haute énergie.

plus faible énergie (Figure 5.8.a)) ou inversement (Figure 5.8.b)). Ainsi, notre force devient

$$f = \frac{\mu}{2} [1 - 3 \cos^2(\theta)] . \quad (5.6)$$

Intéressons nous tout d’abord au premier cas, des hautes énergies vers les basses énergies. Notons  $\theta_c$ , l’angle critique pour lequel la force s’annule,

$$\begin{aligned} f(\theta_c) &= 0 \\ \Leftrightarrow 1 - 3 \cos^2(\theta_c) &= 0 \\ \Leftrightarrow \theta_c &= \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \simeq 0.955. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Cela signifie que lorsque l’angle  $\theta$  est compris entre  $\frac{-\pi}{2}$  et  $-\theta_c$  (ou encore entre  $\theta_c$  et  $\frac{\pi}{2}$ ), la force est répulsive et il n’y a pas de normale, donc pas de frottement. Ainsi, dans le premier cas, il n’y a pas de frottement jusqu’à l’angle  $-\theta_c$ . On a donc

$$\begin{aligned} w &= \int \frac{\mu}{2} [1 - 3 \cos^2(\theta)] d\theta \\ &= \frac{\mu}{2} \left[ \frac{-\theta}{2} - \frac{3}{4} \sin(2\theta) \right] + C \end{aligned} \quad (5.8)$$

ou  $C$  est la constante d’intégration. On sait que  $w(-\theta_c) = 0$  car la force normale est nulle. Ainsi,

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{2} \left[ \frac{\theta_c}{2} - \frac{3}{4} \sin(-2\theta_c) \right] + C &= 0 \\ C &= \frac{\mu}{2} \left[ -\frac{\theta_c}{2} - \frac{3}{4} \sin(2\theta_c) \right] \end{aligned} \quad (5.9)$$

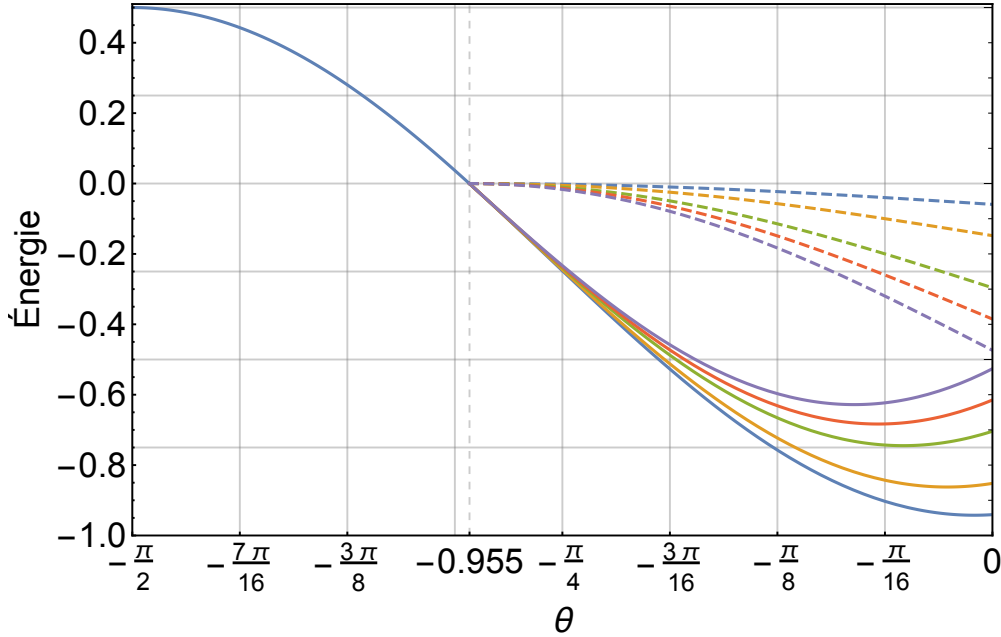


FIGURE 5.9 – Énergie adimensionnelle en fonction de  $\theta$  pour le chemin a) (haute énergie vers basse énergie). Lorsque  $\theta \leq -\theta_c \simeq -0.955$ , la force est répulsive et il n’y a pas de force de frottement. Lorsque  $\theta \geq -\theta_c$ , la force est attractive et on ajoute alors la contribution du travail des forces de frottement à l’énergie. En traits discontinus, le travail  $w(\mu)$  avec  $\mu = 0.1, 0.25, 0.5, 0.65, 0.8$  (de haut en bas). En traits continus, l’énergie  $u - w(\mu)$ .

Finalement, on a

$$w = \frac{\mu}{2} \left[ \frac{-\theta}{2} - \frac{3}{4} \sin(2\theta) \right] + \frac{\mu}{2} \left[ -\frac{\theta_c}{2} - \frac{3}{4} \sin(2\theta_c) \right]. \quad (5.10)$$

Ce travail des forces non conservatives ainsi que l’énergie totale sont représentés à la Figure 5.9, pour différentes valeurs de  $\mu$ . L’ajout de ce travail va augmenter l’énergie totale, et induire un puits de potentiel.

#### 5.4.2 Cas complexe : $\alpha(\theta)$

Pour un angle  $\theta$  donné, il existe un seul angle  $\alpha$  minimisant l’énergie (voir Figures 2.2 et 5.10). C’est pourquoi nous pouvons considérer  $\alpha$  comme une fonction de  $\theta$ . On ne connaît pas l’expression analytique de cette fonction, mais nous l’avons trouvé numériquement (en minimisant  $u$ ). Étant donné que  $\alpha$  varie avec  $\theta$ , le mouvement de la bille peut être vu comme la combinaison de deux mouvement : un roulement sans glissement (correspondant à un angle  $\alpha = 2\theta$ ) et une translation avec

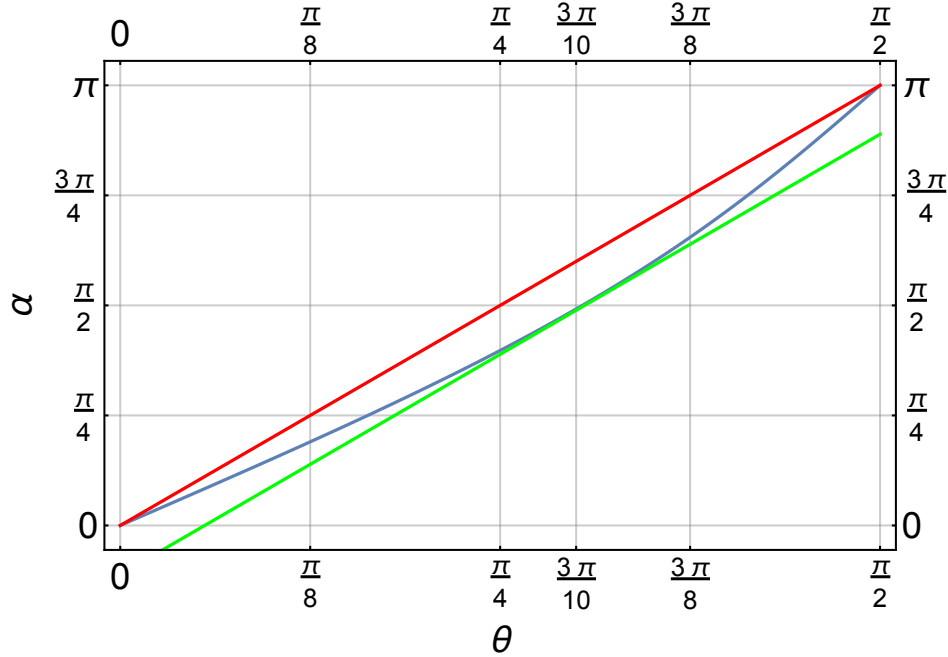


FIGURE 5.10 – En bleu, la fonction  $\alpha(\theta)$  minimisant l'énergie d'interaction  $u$ . En rouge, la fonction  $\alpha = 2\theta$  correspondant à du roulement sans glissement entre les billes. En vert, la même fonction translatée de  $\frac{\pi}{9}$ , montrant la portion de frottement du premier cas.

glissement (qui dans notre cas a lieu car  $\alpha(\theta) \leq 2\theta$ ). Comme son nom l'indique, le roulement sans glissement n'induit pas de frottement et ne nous intéresse donc pas. Seul la translation va nous intéresser. De plus, étant donné que la force est attractive pour tout  $\theta$  dans cette situation, il y aura une force normale, et donc un frottement pour tout déplacement (contrairement au cas précédent).

Nous allons donc intégrer numériquement la force (5.5) sur le chemin  $-\frac{\pi}{2}, 0$ . Cependant, l'entièreté de cette force normale n'agit pas en tant que force de frottement, car nous devons prendre en compte le roulement. Nous avons trouvé que l'angle  $\alpha$  prend au maximum un retard de  $\frac{\pi}{9}$  sur le roulement, pour ensuite rattrape son retard. Il va donc nous falloir un préfacteur rendant compte uniquement de la contribution des frottements. Sur le déplacement de la bille d'un angle  $\pi/2$ , le frottement se fait sur un angle  $2\pi/9$ , c'est à dire que la contribution du frottement est de  $4/9$  du déplacement totale. C'est donc le préfacteur que l'on va ajouté au travail des forces de frottement. Ainsi, les résultats du travail des forces de frottement et de l'énergie résiduelle du mouvement  $u - w$  sont présentés sur la Figure 5.11. On remarque que lorsque  $\theta$  est petit, une barrière de potentiel apparaît à mesure que l'on augmente le coefficient de friction  $\mu$ . Proche de  $\theta = 0$ , l'énergie minimum du

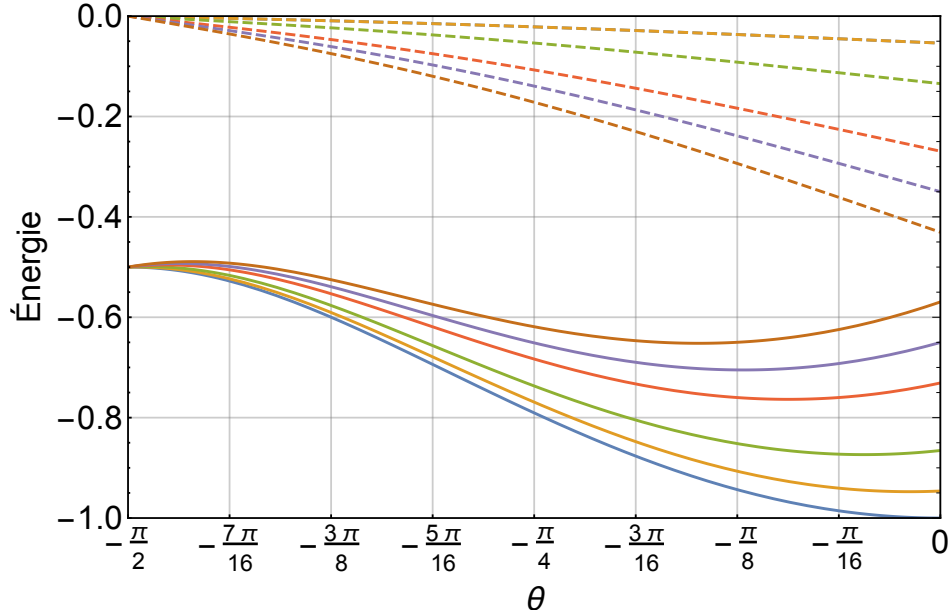


FIGURE 5.11 – En traits discontinus : le travail  $w(\mu)$ , pour les valeurs  $\mu = 0.1, 0.25, 0.5, 0.65, 0.8$  (de haut en bas). En traits plein : l'énergie  $u - w(\mu)$  lors du déplacement d'une bille (mêmes valeurs de  $\mu$  et même code couleur que pour les traits discontinus).

potentiel augmente et se déplace vers des  $\theta$  plus petits avec l'augmentation de  $\mu$ . Expérimentalement, on ne remarque pas ce déplacement du minimum vers des valeurs de  $\theta$  plus faible, ce qui peut suggérer que le chemin emprunté par les dipôles dans la réalité est encore différent du chemin que nous venons de choisir. Une étude plus approfondie, avec un plus grands nombre de billes en contact est probablement nécessaire.

## 5.5 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons mis en évidence numériquement, et expérimentalement l'existence de métastabilité dans les magnétotubes. Nous avons observé expérimentalement que lors de la réorientation des dipôles, un son est émis à cause de la friction des billes en contact les une avec les autres. Plus le tube est long, plus la perturbation met de temps à se propager d'une extrémité à l'autre du tube, et plus l'échantillon sonore enregistré est long. Nous avons modélisé ce phénomène par un front de réorientation qui se propage de proche en proche d'une extrémité à l'autre du tube. Enfin, nous avons estimé le travail des forces de frottement entre deux billes. Nous avons montré que la dynamique de réorientation des dipôles fait intervenir une

combinaison de deux mouvements, à savoir du roulement et du glissement des billes les unes sur les autres.

# Chapitre 6

## Conclusion et perspectives

L'étude des magnétostructures permet de comprendre quelles sont les orientations préférentielles des dipôles lors de leur auto-assemblage. Par conséquent, on peut évaluer si une structure est plus stable et résistante qu'une autre, comme nous l'avons montré pour une chaîne qui se replie et pour un tube qui s'écrase. Ainsi, ces auto-assemblages peuvent servir à la microfabrication et la création de métamatériaux par exemple.

Bien qu'un tube magnétique soit simplement formé de petits aimants sphériques, nous venons de mettre en évidence des situations métastable, notamment grâce à des simulations numériques effectuées à l'aide de la programmation en parallèle sur un super-calculateur, mais également expérimentalement en assemblant des billes magnétiques. Nous avons montré la complexité du paysage énergétique de ces structures. Lorsque les tubes sont courts, les dipôles s'arrangent pour former des boucles. Lorsqu'ils sont longs, ils forment des chaînes le long de l'axe de tube. Notons que cette transition s'effectue à diamètre égal, pour des tubes plus longs lorsque le réseau est hexagonal que lorsqu'il est carré. De plus, pour un réseau carré qui aurait un nombre  $l$  impair de billes, une des chaînes va être frustrée ce qui aura pour conséquence une augmentation de l'énergie. Finalement, dans le dernier chapitre, nous avons étudié les frottements existant entre deux billes en contact, résultant de la combinaison d'un roulement et d'un glissement. Ce dernier point doit faire l'objet d'une étude approfondie avec un système composé de plus de deux billes.

Tout au long de ce travail, nous avons exploré les différentes interactions qui existent entre des sphères magnétiques ayant les mêmes propriétés physiques (même tailles et même moment magnétique). Ainsi, une perspective de recherche serait par exemple de créer de nouvelles structures grâce à plusieurs tailles de billes différentes. On pourrait également étudier les mêmes structures en remplaçant certaines billes,



par des billes ayant un moment magnétique plus ou moins important, et étudier l'énergie d'interaction. Il est également possible de créer des supports pour fixer les positions des billes [16, 17], et ainsi créer des structures 3D plus complexes.

# Bibliographie

- [1] G.M.Whitesides and B.Grzybowski. Self-assembly at all scales. *Science*, 295 :2418–2421, (2002).
- [2] B.A.Grzybowski, H.A.Stone, and G.M.Whitesides. Dynamic self-assembly of magnetized, millimetre-sized objects rotating at a liquid-air interface. *Nature*, 405 :1033–1036, (2000).
- [3] L.Abelmann, T.A.G.Hageman, P.A.Löthman, M.Mastrangeli, and M.C.Elwenspoek. Three-dimensional self-assembly using dipolar interaction. *Sci. Adv.*, 6 : eaba2007, (2020).
- [4] S.Egri and G.Bihari. Self-assembly of magnetic spheres : a new experimental method and related theory. *J. Phys. Commun.*, 2 :105003, (2018).
- [5] S.Wu, W.Hu, Q.Ze, M.Sitti, and R.Zhao. Multifunctional magnetic soft composites : a review. *Multifunct. Mater.*, 3 :042003, (2020).
- [6] A.Darras, J.Fiscina, M.Pakpour, N.Vandewalle, and G.Lumay. Ribbons of superparamagnetic colloids in magnetic field. *Eur. Phys. J. E*, 39 :47, (2016).
- [7] P.Tierno. Recent advances in anisotropic magnetic colloids : realization, assembly and applications. *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 16 :23515–23528, (2014).
- [8] Y.Collard, G.Grosjean, and N.Vandewalle. Magnetically powered metachronal waves induce locomotion in self-assemblies. *Communication Physics*, 3 :112, (2020).
- [9] M.Golosovsky, Y.Saado, and D.Davidov. Self-assembly of floating magnetic particles into ordered structures : A promising route for the fabrication of tunable photonic band gap materials. *Appl. Phys. Lett.*, 75 :4168, (1999).
- [10] S.Yuge, M.Akiyamaa, and T.Komatsu. An escherichia coli trap in human serum albumin microtubes. *Chem. Commun.*, 68 :34002, (2014).
- [11] N.I.Zheludev and Y.S.Kivshar. From metamaterials to metadevices. *Nature Materials*, 11 :917–924, (2012).
- [12] J.D.Jackson. *Classical Electrodynamics 3rd Edition*. John Wiley and sons, 1999.

- [13] J.Boisson, C.Rouby, J.Lee, and O.Doaré. Dynamics of a chain of permanent magnets. *EPL*, 109(3) :34002, (2015).
- [14] J.Schockmel. *Self-organization of a monolayer of magnetized beads*. PhD thesis, Université de Liège, 2019.
- [15] K.H.Taylor. *The influence of magnetic cohesion on the stability of granular slopes*. PhD thesis, University of Nottingham, 2009.
- [16] S.Borgers, S.Völkel, W.Schöpf, and I.Rehberg. Exploring cogging free magnetic gears. *Am. J. Phys.*, 86 :460, (2018).
- [17] S.Hartung, F.Sommer, S.Völkel, J.Schönke, and I.Rehberg. Assembly of eight spherical magnets into a dotriacontapole configuration. *Phys.Rev. B*, 96 :214424, (2018).
- [18] D.S.Borges, H.J.Herrmann, H.A.Carmona, J.S.Andrade Jr., and A.D.Araujo. Morphological transition between patterns formed by threads of magnetic beads. *Phys. Rev. Lett.*, 126 :118001, (2021).
- [19] N.Vandewalle and S.Dorbolo. Magnetic ghosts and monopoles. *New J. Phys*, 16 :013050, (2014).
- [20] R.Messina and I.Stanković. Assembly of magnetic spheres in strong homogeneous magnetic field. *Physica A*, 466 :10–20, (2017).
- [21] R.Messina, L.Abou Khalil, and I.Stankovic. Self-assembly of magnetic balls : From chains to tube. *Phys.Rev. E*, 89(011202), (2014).
- [22] O.Ciftja. Results for the ground state energy of a finite system of dipoles in a one-dimensional crystal lattice. *Results in Physics*, 17 :103178, (2020).
- [23] D.Vella, E. du Pontavice, C.L.Hall, and A.Goriely. The magneto-elastica : from self-buckling to self-assembly. *Proc. R. Soc. A*, 470, (2014).
- [24] N.Vandewalle and A.Wafflard. The ground state of magnetocrystals. *Phys. Rev. E*, 103 :032117, (2021).
- [25] R.Messina and I.Stanković. Self-assembly of magnetic spheres in two dimensions : The relevance of onion-like structures. *EPL*, 110 :46003.
- [26] J.B.Goodenough. *Magnetism and the chemical bound*. Interscience – John Wiley and sons, 1963.
- [27] S.Hidalgo-Caballero, J.M.Salazar, R.I.Becerra-Deana, Y.Y.Escobar-Ortega, and F.Pacheco-Vázquez. Mechanical properties of macroscopic magnetocrystals. *J. Magn. Magn. Mater.*, 479 :149–155, (2019).
- [28] W.Wenzel and K.Hamacher. Stochastic tunneling approach for global minimization of complex potential energy landscapes. *Phys. Rev. Lett.*, 82(15) :3003, (1999).

- [29] O.Louant, editor. *Message Passing Interface : Distributed-Memory Parallel Programming*. CÉCI, octobre 2020.
- [30] D.François, editor. *Introduction to Parallel Computing*. CÉCI, octobre 2020.
- [31] D.François, editor. *Preparing, submitting and managing jobs with Slurm*. CÉCI, octobre 2020.
- [32] A. Grzybowski and A. Bróadka. Lekner type method for summing the dipole-dipole interactions in computer simulations of one- and two-dimensionally periodic systems. *Mol. Phys.*, 101(8) :1079–1088, (2003).