



**ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ**

**ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ**

**ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ**

# **Δυναμική της μαγνήτισης σε πεπερασμένη θερμοκρασία σύνθετων νανοδομικών υλικών**

**Πατσόπουλος Αριστοτέλης**

Διδακτορική Διατριβή

Δεκέμβριος 2019



Το έργο συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση του ανθρώπινου ερευνητικού δυναμικού μέσω της υλοποίησης διδακτορικής έρευνας» (MIS-5000432), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ)



**Επιχειρησιακό Πρόγραμμα**  
**Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού,**  
**Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση**

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης





# Ευχαριστίες

Η διατριβή αυτή είναι το αποτέλεσμα σκληρής προσπάθειας σε περίοδο που η βασική έρευνα δεν αποτελεί προτεραιότητα. Η ολοκλήρωσή της δεν θα ήταν δυνατή χωρίς την καθοριστική συμβολή ορισμένων ανθρώπων, στους οποίους θα ήθελα να εκφράσω τις ευχαριστίες μου.

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Αναπληρωτή Καθηγητή της ΑΣΠΑΙΤΕ κ. Κεχράκο Δημήτριο, που ήταν ο κύριος επιβλέπων της διατριβής, για την ουσιαστική καθοδήγηση και υποστήριξη που επέδειξε καθ'όλη τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών. Οι συνεχείς συζητήσεις και η διδασκαλία του ήταν καθοριστικής σημασίας τόσο για την ολοκλήρωση της διατριβής όσο και για την επιστημονική μου εξέλιξη συνολικά.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Ομότιμο Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ, κ. Τριμπέρη Γεώργιο που μου έμαθε να σκέφτομαι σαν φυσικός. Η πολυετής του καθοδήγηση και υποστήριξη όλα τα χρόνια των σπουδών μου, προπτυχιακών και μεταπτυχιακών, αποτελεί πάντα σημείο αναφοράς.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Επίκουρο Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ, κ. Σιμσερίδη Κωσταντίνο, για την τιμή που μου έκανε να αποτελέσει μέλος της τριμελούς επιτροπής αλλά και για το ενδιαφέρον που επιδεικνυε καθ'όλη τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών.

Ευχαριστώ, τα υπόλοιπα μέλη της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής, τον Επίκουρο Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ κ. Λυκοδήμο Βλάσιο, τον Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ κ. Στεφάνου Νικόλαο, τον Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ κ. Μαυρόπουλο Φοίβο και τον Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ κ. Φραντζεσκάκη Δημήτριο για τις παρατηρήσεις και τα εποικοδομητικά τους σχόλια.

Ακόμα, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους Farzad Nasirpouri, Cristina Bran, Seyed-

Majid Peighambari-Sattari, Ester M. Palmero, Eider Berganza Eguiarte και Manuel Vazquez για τη συνεργασία και την παραγωγή πειραματικών αποτελεσμάτων κατά τη μελέτη των γεωμετρικά διαμορφωμένων σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω για το ενδιαφέρον που επέδειξαν αλλά και για τις συζητήσεις σχετικές με το περιεχόμενο της εργασίας τον Επίκουρο Καθηγητή της ΑΣΠΑΙΤΕ κ. Μουτή Νικόλαο και τον Καθηγητή του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, κ. Παναγιωτόπουλο Ιωάννη.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους τους διδάσκοντες και το προσωπικό του τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ για το υψηλό επίπεδο διδασκαλίας και την άψογη οργάνωση και λειτουργία του τομέα.

Ακόμα, τους συμφοιτητές μου για τις στιγμές και τις σκέψεις που μοιράστηκαν μαζί μου στη διάρκεια των χρόνων εκπόνησης της διατριβής.

Επίσης, ευχαριστώ τα μέλη του Εργαστηρίου Φυσικής του Παιδαγωγικού Τμήματος της ΑΣΠΑΙΤΕ για την απρόσκοπτη πρόσβαση στην υπολογιστική υποδομή, με χρήση της οποίας υλοποιήθηκαν οι υπολογισμοί που περιλαμβάνονται στην παρούσα διατριβή.

Η οικονομική στήριξη της συμμετοχής μου σε Διεθνή Συνέδρια από (i) τον ΕΛΚΕ του ΕΚΠΑ και (ii) τον ΕΛΚΕ της ΑΣΠΑΙΤΕ μέσω του προγράμματος Nanosky (No 80146), μου έδωσαν την ευκαιρία να διαδώσω στην επιστημονική κοινότητα τα αποτελέσματα της διατριβής και τους αποδίδω τις ευχαριστίες μου.

Τέλος, ευχαριστώ τη σύντροφό μου Μυρτώ και την οικογένειά μου για τις δυσκολίες που υπέμειναν μαζί μου.

# Περίληψη

Τα μαγνητικά νανοσύρματα και οι νανοσωλήνες παρουσιάζουν ιδιαίτερο τεχνολογικό ενδιαφέρον εξαιτίας της αυξημένης ανισοτροπίας σχήματος που παρουσιάζουν. Ακόμα, η σχεδόν μονοδιάστατη γεωμετρία τους επιτρέπει την ελεγχόμενη διάδοση μαγνητικών αυτο-εντοπισμένων (σολιτονικών) διεγέρσεων (μαγνητικά τοιχώματα, σκυρμιόνια) που μπορούν να αξιοποιηθούν ως φορείς ψηφιακής πληροφορίας σε διατάξεις μονοδρομικής μνήμης. Σε αυτό το πλαίσιο, το φαινόμενο πόλωσης - ανταλλαγής προτείνεται ως φυσικός μηχανισμός ελέγχου της ανισοτροπίας των μαγνητικών νανοσυρμάτων, ενώ διερευνάται ο σχηματισμός των μαγνητικών διεγέρσεων αλλά και μέθοδοι που επιτρέπουν τον έλεγχο της διάδοσής τους. Απώτερος σκοπός είναι η ανάδειξη των μικροσκοπικών μηχανισμών αντιστροφής της μαγνήτισης που μπορούν να οδηγήσουν στη βελτιστοποίηση των τεχνολογικών εφαρμογών τους.

Στο κεφάλαιο 1, περιγράφονται οι βασικές αλληλεπιδράσεις που διέπουν τη μαγνητική συμπεριφορά των συστημάτων που μελετώνται καθώς και οι διαφορετικές περιπτώσεις μαγνητικής διάταξης που προκύπτουν από τον ανταγωνισμό αυτών των αλληλεπιδράσεων. Πραγματοποιείται εισαγωγική αναφορά στο φαινόμενο πόλωσης - ανταλλαγής αλλά και στις μαγνητικές διαμορφώσεις σολιτονικού χαρακτήρα και στα μαγνητικά νανοσύρματα, που αποτελούν το τρίπτυχο μελέτης της παρούσας διατριβής.

Στο κεφάλαιο 2, παρουσιάζεται η υπολογιστική μικρομαγνητική μέθοδος μοντελοποίησης μέσω της οποίας γίνεται η περιγραφή των φυσικών συστημάτων αλλά και η μέθοδος Metropolis Monte Carlo που είναι η μέθοδος προσομοίωσης μέσω της οποίας παράγονται τα αριθμητικά αποτελέσματα.

Στο κεφάλαιο 3, μελετάται το φαινόμενο πόλωσης - ανταλλαγής σε κυλινδρικά νανοσύρματα μορφολογίας σιδηρομαγνητικού (ΣΔ) πυρήνα / αντισιδηρομαγνητι-

κού (ΑΣ) φλοιού με σκοπό τη διερεύνηση (α) της δυνατότητας διαμόρφωσης της ενεργού ανισοτροπίας του συστήματος και (β) του μηχανισμού διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων. Η μελέτη ανέδειξε το ρόλο του ΑΣ φλοιού στη διαμόρφωση ενός πολύπλοκου μηχανισμού αντιστροφής της μαγνήτισης σε σχέση με τα απλά ΣΔ νανοσύρματα, ενώ η ύπαρξη πολυκρυσταλλικότητας στο φλοιό, εισάγει έναν επιπλέον άξονα εύκολης μαγνήτισης, που οδηγεί σε βελτιστοποίηση του φαινομένου πόλωσης - ανταλλαγής σε διεύθυνση εκτός του κεντρικού άξονα. Επίσης, οδηγεί και σε αύξηση της κρίσιμης διαμέτρου στην οποία πραγματοποιείται μετάβαση από εγκάρσια μαγνητικά τοιχώματα σε μαγνητικές δίνες. Τα αποτελέσματα είναι σε ποιοτική συμφωνία με πρόσφατες πειραματικές μελέτες νανοσυρμάτων Co/CoO.

Στο κεφάλαιο 4, μελετάται η αξιοποίηση της χωρικής διαμόρφωσης της διαμέτρου ενός ΣΔ νανοσύρματος με σκοπό τη δυνατότητα ελεγχόμενης παγίδευσης των μαγνητικών τοιχωμάτων. Η ελεγχόμενη παγίδευση μαγνητικών τοιχωμάτων σε σχεδόν μονοδιάστατα μαγνητικά συστήματα, αποτελεί απαραίτητο στοιχείο προκειμένου αυτά να αξιοποιηθούν σε μελλοντικές διατάξεις μαγνητικής μνήμης. Σε συμφωνία με πειραματικά αποτελέσματα, συμπεραίνεται ότι οι στενώσεις κατά μήκος ενός νανοσύρματος λειτουργούν ως ελεγχόμενα (από το εξωτερικό πεδίο) κέντρα παγίδευσης.

Στο κεφάλαιο 5, μελετώνται οι συνθήκες σχηματισμού μαγνητικών σκυρμιονίων σε σύνθετα κυλινδρικά νανοσύρματα με πυρήνα βαρέος μετάλλου (HM) και φλοιό σιδηρομαγνητικό. Τα εν λόγω νανοσύρματα προτείνονται ως εναλλακτική προοπτική για την αντιμετώπιση της εξαΰλωσης των σκυρμιονίων σε επίπεδες νανολωρίδες με ελεύθερα άκρα εξαιτίας του σκυρμιονικού φαινομένου Hall και της παρουσίας των ελεύθερων άκρων. Αναδεικνύεται η δυνατότητα σταθεροποίησης σκυρμιονίων σε κυλινδρικούς ΣΔ φλοιούς με αναλλοίωτα τα γεωμετρικά τους χαρακτηριστικά (σχήμα, μέγεθος), εφόσον η καμπυλότητα είναι τουλάχιστον συγκρίσιμη με την ακτίνα του σκυρμιονίου (κριτήριο ευστάθειας).

Τέλος, στο κεφάλαιο 6 συνοψίζονται τα κεντρικά συμπεράσματα της διατριβής και διατυπώνονται οι προοπτικές περαιτέρω μελέτης.



# Abstract

Elongated magnetic nanowires are characterized by enhanced anisotropy due to their shape and hold promises for major advances in different areas of modern technology ranging from magnetic recording and spintronics to biomedicine. A new perspective in magnetic memory devices has also emerged, stimulated by the manifested feasibility to manipulate the domain wall motion in these quasi one-dimensional nanostructures and paved new paths for information storage and spintronics applications. In this effort to develop magnetic materials with desired properties, the exchange bias effect has long been recognized as a means to tailor the hysteresis characteristics of nanostructured magnetic materials while the fundamental research related to magnetic nanostructures remains to reveal the various factors that govern the magnetization reversal mechanism.

In chapter 1, we describe the basic interactions controlling the magnetic behavior of the studied systems and the magnetic ordering originating from their competition. We also perform an introductory interpretation of the exchange - bias effect and elucidate basic theory of magnetic nanowires and magnetic solitonic textures which are the fundamentals of this thesis.

In chapter 2, we introduce the computational micromagnetic approach that we use to model the magnetic structure of the studied systems and the Metropolis Monte Carlo simulation from which numerical results are derived.

In chapter 3, we study the magnetic properties of cylindrical ferromagnetic core / antiferromagnetic shell nanowires in order to elucidate the impact of the oxidized shell on the magnetic properties and the magnetization reversal mechanism. We find that the coupling to the antiferromagnetic shell introduces a complex reversal mechanism comparing with the bare ferromagnetic nanowires. We also demonstrate that the coupling to a polycrystalline antiferromagnetic shell leads to maximum

exchange - bias in an off - axis direction. In addition, polycrystallinity increases the critical core diameter for transition from transverse to vortex domain walls. Our results are in qualitative agreement with recent experimental studies of Co/CoO nanowires.

“Domain wall traps” have been engineered and well exploited in nanostrips by creating a geometrical trapping site, e.g. a single notch along a stripe. In chapter 4, we report our systematic study on the domain wall structure and its nucleation / propagation in tri-segmented diameter - modulated ferromagnetic nanowires. We find out that the magnetization behavior of single DM - NWs exhibits the significance of positional ordering of thick and thin segments, distinguished by two distinct geometries including: dumbbell - type (type I) and rolling pin - type (type II). Based on our numerical simulations, it was evidenced that the wide - narrow junctions create trap sites for domain walls where the narrow segment restricts their motion.

In chapter 5, we study the formation of magnetic skyrmions in curved geometries such as nanotubes. We address systematically the impact of curvature in the formation and in the geometrical features of magnetic skyrmions, defining the limitations in which this formation is stable.

Finally, in chapter 6, we summarize the basic conclusions of this thesis and we highlight some open questions for future research.

# Περιεχόμενα

<b>Γλωσσάρι</b>	<b>13</b>
<b>Ακρωνύμια</b>	<b>15</b>
<b>1 Εισαγωγή</b>	<b>17</b>
1.1 Η προέλευση του Μαγνητισμού . . . . .	17
1.2 Κυρίαρχες αλληλεπιδράσεις . . . . .	20
1.2.1 Αλληλεπιδράσεις Ανταλλαγής . . . . .	20
1.2.2 Αλληλεπιδράσεις Dzialoshinskii - Moriya . . . . .	23
1.2.3 Διπολικές αλληλεπιδράσεις . . . . .	26
1.2.4 Μαγνητική ανισοτροπία . . . . .	27
1.2.5 Ενέργεια Zeeman . . . . .	27
1.3 Μαγνητική διάταξη και μαγνητικές περιοχές . . . . .	28
1.4 Νανομαγνητισμός - Σπιντρονική . . . . .	30
1.5 Φαινόμενο Πόλωσης - Ανταλλαγής . . . . .	33
1.5.1 Μεσοσκοπικά μοντέλα μελέτης του Φαινομένου Πόλωσης - Ανταλλαγής . . . . .	35
1.6 Μαγνητικές διαμορφώσεις σολιτονικού χαρακτήρα . . . . .	46
1.7 Σχεδόν μονοδιάστατες μαγνητικές νανοδομές . . . . .	51
1.8 Σκοπός της διατριβής . . . . .	52
<b>2 Θεωρητικό και υπολογιστικό υπόβαθρο</b>	<b>55</b>
2.1 Μικρομαγνητική περιγραφή μαγνητικής τάξης . . . . .	55
2.1.1 Υπολογιστική μοντελοποίηση αλληλεπιδράσεων . . . . .	57
2.2 Μέθοδος προσομοίωσης της μαγνητικής συμπεριφοράς . . . . .	59
2.2.1 Η μέθοδος Monte Carlo και ο αλγόριθμος Metropolis . . . . .	59

2.2.2	Πρωτόκολλο Προσομοίωσης . . . . .	63
<b>3</b>	<b>Φαινόμενο Πόλωσης - Ανταλλαγής σε διμαγνητικά νανοσύρματα</b>	<b>65</b>
3.1	Εισαγωγή . . . . .	65
3.2	Μοντελοποίηση και μέθοδος προσομοίωσης . . . . .	68
3.3	Αριθμητικά Αποτελέσματα . . . . .	73
3.3.1	Μελέτη νανοσυρμάτων με μονοκρυσταλλικό φλοιό . . . . .	73
3.3.2	Επίδραση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού . . . . .	84
3.3.3	Χαρακτήρας των μαγνητικών τοιχωμάτων . . . . .	96
3.4	Συμπεράσματα . . . . .	98
<b>4</b>	<b>Δυναμική μαγνητικών τοιχωμάτων σε γεωμετρικά διαμορφωμένα νανοσύρματα</b>	<b>101</b>
4.1	Εισαγωγή . . . . .	101
4.2	Μοντελοποίηση και μέθοδος προσομοίωσης . . . . .	103
4.3	Αριθμητικά Αποτελέσματα . . . . .	103
4.4	Συμπεράσματα . . . . .	109
<b>5</b>	<b>Μαγνητικά σκυρμιόνια σε καμπυλωμένες νανοδομές</b>	<b>111</b>
5.1	Εισαγωγή . . . . .	111
5.2	Μοντελοποίηση και μέθοδος προσομοίωσης . . . . .	113
5.3	Αριθμητικά αποτελέσματα . . . . .	116
5.3.1	Σκυρμιονική φάση και καμπυλότητα . . . . .	116
5.3.2	Μελέτη μεγέθους και σχήματος μαγνητικών σκυρμιονίων . . . . .	119
5.4	Συμπεράσματα . . . . .	122
<b>6</b>	<b>Επίλογος</b>	<b>125</b>
<b>A'</b>	<b>Παράρτημα</b>	<b>127</b>
A'.1	Διακριτοποίηση μικρομαγνητικής ενέργειας . . . . .	127
A'.2	Υπολογισμός θέσης και ταχύτητας μαγνητικών τοιχωμάτων . . . . .	129
A'.3	Υπολογισμός τοπολογικού φορτίου μαγνητικών σκυρμιονίων . . . . .	130
A'.4	Υπολογισμός σχήματος και ακτίνας μαγνητικών σκυρμιονίων . . . . .	131

# Γλωσσάρι

Το κείμενο αποδίδεται στην Ελληνική γλώσσα. Παρατίθεται το παρακάτω γλωσσάρι στο οποίο υπάρχει η ελληνική μετάφραση της διεθνούς ορολογίας που είναι απαραίτητη για την κατανόηση του κειμένου.

- Exchange Interactions: Αλληλεπιδράσεις Ανταλλαγής
- Dipolar Interactions: Διπολικές αλληλεπιδράσεις
- Magnetic Anisotropy: Μαγνητική Ανισοτροπία
- Ferromagnet: Σιδηρομαγνήτης
- Antiferromagnet: Αντισιδηρομαγνήτης
- Bimagnetic: Διμαγνητικός
- Nanomagnetism: Νανομαγνητισμός
- Spintronics: Σπιντρονική
- Domain Wall: Μαγνητικό τοίχωμα
- Soliton: Σολιτόνιο
- Magnetic Skyrmion: Μαγνητικό Σκυρμιόνιο
- Racetrack Memory: Μονοδρομική Μνήμη
- Coherent Rotation: Σύμφωνη Στροφή
- Nanowire: Νανόσυρμα
- Nanoparticle: Νανοσωματίδιο
- Heterostructures: Ετεροδομές
- Skyrmion Hall Effect: Σκυρμιονικό φαινόμενο Hall
- Drag Effect: Φαινόμενο Συρμού

- Exchange Bias: Φαινόμενο Πόλωσης Ανταλλαγής
- Topological Charge: Τοπολογικό Φορτίο
- Vorticity: Στροβιλισμός
- Micromagnetism: Μικρομαγνητισμός
- Field Cooling: Ψύξη υπό Πεδίο
- Hysteresis Loop: Βρόχος Υστέρησης

# Ακρωνύμια

Για λόγους συντομίας, χρησιμοποιούνται στο κείμενο ακρωνύμια σε όρους που χρησιμοποιούνται συχνά μέσα στο κείμενο. Παρατίθενται παρακάτω τα ακόλουθα ακρωνύμια,

- ΣΔ: Σιδηρομαγνητικός
- ΑΣ: Αντισιδηρομαγνητικός
- ΔΜ: Διμαγνητικός
- ΜΣ: Μονοκρυσταλλικός
- ΠΣ: Πολυκρυσταλλικός
- ΦΠΑ: Φαινόμενο Πόλωσης Ανταλλαγής





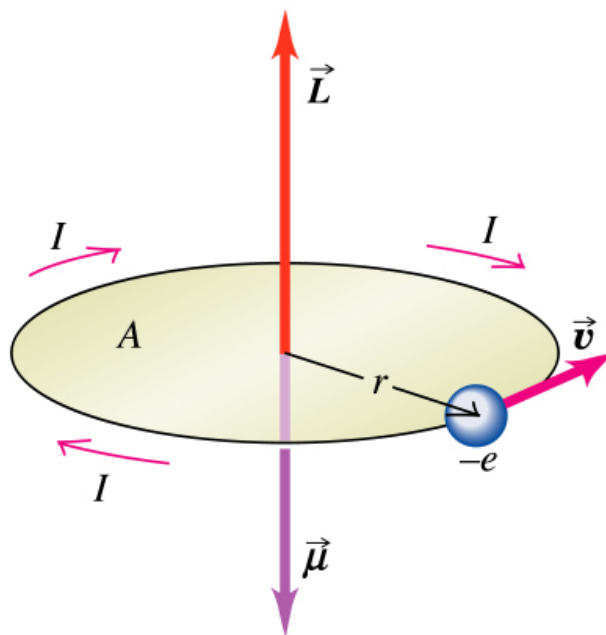
# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή

Η μεσοσκοπική Φυσική, όπως συνήθως αναφέρεται, είναι το πεδίο της Φυσικής που μελετά συστήματα μεταξύ μικροσκοπικών και μακροσκοπικών διαστάσεων με σκοπό την σύνδεση των μακροσκοπικών ιδιοτήτων των διαφόρων υλικών με τα μικροσκοπικά τους χαρακτηριστικά. Μεσοσκοπικά φαινόμενα μπορούν να παρατηρηθούν σε συστήματα διαφορετικών διαστάσεων που ποικίλουν από μερικά νανόμετρα σε μερικά μικρόμετρα, καθώς ακριβής οριοθέτηση των διαστάσεων των συστημάτων αυτών πραγματοποιείται μέσω των χαρακτηριστικών μηκών τους. Η μελέτη συστημάτων σε μεσοσκοπικό επίπεδο, έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον καθώς εκεί κρύβεται η προέλευση των ιδιοτήτων των σύγχρονων μικρο- και νανο - διατάξεων. Διερευνώντας την επίδραση που έχουν τα μικροσκοπικά χαρακτηριστικά στη μακροσκοπική συμπεριφορά ενός υλικού ή μιας διάταξης, ανοίγει ο δρόμος για την τεχνολογική αξιοποίησή τους αλλά και για την ανάπτυξη υλικών με βελτιωμένες ιδιότητες.

### 1.1 Η προέλευση του Μαγνητισμού

Η θεμελιώδης πηγή του μαγνητισμού είναι οι μαγνητικές ροπές, που δημιουργούνται εντός των ατόμων των υλικών [1, 2, 3, 4]. Στα πλαίσια μια κλασικής προσέγγισης, η μαγνητική ροπή  $\mu$  που δημιουργείται εξαιτίας της περιφοράς του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα του ατόμου, είναι  $\mu = IA$ , όπου  $A = \pi r^2$  είναι το εμβαδόν της κυκλικής τροχιάς. Η διεύθυνση του διανύσματος είναι κάθετη ως προς το επίπεδο της τροχιάς (Σχ.1.1).



Σχήμα 1.1: Κίνηση ηλεκτρονίου  $e^-$  σε ατομική τροχιά περιμέτρου  $A$  σύμφωνα με το ατομικό πρότυπο του Bohr. Προκύπτει, εξαιτίας της τροχιακής στροφορμής  $vecL$ , μαγνητική ροπή  $vec\mu$  αντίθετης φοράς. Όπου  $r$ ,  $u$  είναι το διάνυσμα θέσης και η ταχύτητα του ηλεκτρονίου αντίστοιχα, ενώ  $I$  είναι το ρεύμα που προκαλεί η κίνηση του γύρω από τον πυρήνα του ατόμου.

Η μαγνητική ροπή υπολογίζεται ως εξής,

$$\mu = I \cdot A = \frac{e}{T} \pi r^2 = \frac{eu}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{1}{2} eur \quad (1.1)$$

Γράφοντας τη μαγνητική ροπή συναρτήσει της στροφορμής  $L = mur$ , προκύπτει,

$$\vec{\mu} = -\frac{|e|\hbar}{2m} \vec{L} \quad (1.2)$$

Η μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου, δηλαδή, είναι ανάλογη κατά μέτρο και αντίθετης κατεύθυνσης της τροχιακής στροφορμής. Από το κβαντικό πρότυπο του Bohr, γνωρίζουμε ότι η τροχιακή στροφορμή του ηλεκτρονίου είναι κβαντισμένη και πως το μέτρο της είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της ποσότητας  $\hbar$ ,

$$L = n\hbar. \quad (1.3)$$

Επομένως, η μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου είναι, επίσης, κβαντισμένο μέγε-

θος, δηλαδή,

$$\mu = \frac{e}{2m}(n\hbar) \quad (1.4)$$

Το κβάντο της μαγνητικής ροπής ονομάζεται μαγνητόνη του Bohr και ισούται με,

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \cdot 10^{-24} J/T \quad (1.5)$$

Η κλασική αυτή προσέγγιση, εφαρμόζεται με επιτυχία στο άτομο του υδρογόνου (και ορισμένα υδρογονοειδή ιόντα). Το ηλεκτρόνιο, όμως, ενός ατόμου, ως κβαντικό σωματίδιο, φέρει και την ιδιότητα του spin. Η μαγνητική ροπή που οφείλεται στο spin του ηλεκτρονίου δίνεται από την σχέση,

$$\mu_s = m_s g_0 \mu_B \quad (1.6)$$

Η σχέση μεταξύ της ροπής  $\vec{\mu}_s$  και της στροφορμής του spin  $\vec{S}$  είναι,

$$\vec{\mu}_s = -g_0 \frac{|e|\hbar}{2m} \vec{S} \quad (1.7)$$

Λόγω της ολικής στροφορμής,  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ , προκύπτει μια ανάλογη σχέση,

$$\vec{\mu}_J = -g \frac{|e|\hbar}{2m} \vec{J} \quad (1.8)$$

όπου,  $g$  είναι ο παράγοντας Lande.

Όταν οι μαγνητικές ροπές των ατόμων ευθυγραμμιστούν παράλληλα σε ένα εξωτερικό πεδίο, τότε το υλικό αποκτά μαγνήτιση. Η μαγνήτιση του συστήματος δίνεται από τη σχέση,

$$\vec{M} = \frac{d\vec{\mu}}{dV} \quad (1.9)$$

Η μαγνητική επιδεκτικότητα ορίζεται ως,

$$x = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (1.10)$$

και εκφράζει κατά πόσο εύκολα ή δύσκολα ανταποκρίνεται το σύστημα στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Υλικά με  $\chi < 0$  ονομάζονται διαμαγνητικά, ενώ υλικά με  $\chi > 0$  ονομάζονται σιδηρομαγνητικά ή παραμαγνητικά, ανάλογα με το αν εμφανίζουν ή όχι αυθόρμητη μαγνήτιση, αντίστοιχα.

## 1.2 Κυρίαρχες αλληλεπιδράσεις

Η μαγνητική διάταξη στην κατάσταση ισορροπίας προκύπτει από τον ανταγωνισμό βασικών αλληλεπιδράσεων που οδηγούν σε διαφορετικό προσανατολισμό των μαγνητικών ροπών. Η ολική ενέργεια του συστήματος δίνεται από τη σχέση,

$$E_{total} = E_{ex} + E_{DMI} + E_D + E_{an} + E_Z + \dots \quad (1.11)$$

όπου  $E_{ex}$  είναι η ενέργεια ανταλλαγής,  $E_{DMI}$  είναι η ενέργεια των αλληλεπιδράσεων Dzialoshinskii-Moriya,  $E_D$  είναι η ενέργεια των διπολικών αλληλεπιδράσεων,  $E_{an}$  η ενέργεια ανισοτροπίας και  $E_Z$  η ενέργεια Zeeman. Στην ενότητα αυτή θα γίνει αναφορά στις βασικές αυτές αλληλεπιδράσεις.

### 1.2.1 Αλληλεπιδράσεις Ανταλλαγής

Το 1928 ο Heisenberg, στην προσπάθεια του να ερμηνεύσει τη σιδηρομαγνητική τάξη, ανέπτυξε ένα φαινομενολογικό πρότυπο για τις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής [5, 6, 7]. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές είναι κβαντικής προέλευσης και είναι άμεση συνέπεια της απαγορευτικής αρχής του Pauli, σύμφωνα με την οποία δύο ηλεκτρόνια μπορούν να καταλαμβάνουν την ίδια ενεργειακή κατάσταση μόνο όταν έχουν αντίθετα spins.

Σύμφωνα, λοιπόν, με την απαγορευτική αρχή του Pauli, η κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου είναι αντισυμμετρική (φερμιονικός χαρακτήρας των ηλεκτρονίων). Θεωρώντας δυο πανομοιότυπα άτομα (1 και 2) οι εξισώσεις ιδιοτιμών των δυο ατόμων είναι,

$$H_0^1 \Psi_n(\vec{r}_1) = E_n \Psi_n(\vec{r}_1) \quad (1.12)$$

$$H_0^2 \Psi_m(\vec{r}_2) = E_m \Psi_m(\vec{r}_2). \quad (1.13)$$

Το συνολικό σύστημα περιγράφεται από την εξίσωση,

$$(H_0^1 + H_0^2)(\Psi_n(\vec{r}_1)\Psi_m(\vec{r}_2)) = (E_n + E_m)(\Psi_n(\vec{r}_1)\Psi_m(\vec{r}_2)) \quad (1.14)$$

ενώ, αφού τα άτομα είναι πανομοιότυπα μπορούμε να γίνει εναλλαγή των δεικτών  $n$  και  $m$ ,

$$(H_0^1 + H_0^2)(\Psi_m(\vec{r}_1)\Psi_n(\vec{r}_2)) = (E_m + E_n)(\Psi_m(\vec{r}_1)\Psi_n(\vec{r}_2)). \quad (1.15)$$

Το πρόβλημα ιδιοτιμών του συστήματος γράφεται ως εξής,

$$H\Psi = E\Psi \quad (1.16)$$

με

$$H = H_0^1 + H_0^2, \quad (1.17)$$

$$E = E_n + E_m \quad (1.18)$$

και

$$\Psi = \Psi_1 = \Psi_n(\vec{r}_1)\Psi_m(\vec{r}_2) \quad (1.19)$$

$$\Psi = \Psi_2 = \Psi_m(\vec{r}_1)\Psi_n(\vec{r}_2) \quad (1.20)$$

Το σύστημα των δυο ατόμων είναι, δηλαδή, διπλά εκφυλισμένο. Θεωρώντας την αλληλεπίδραση Coulomb,  $V^{1,2} = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ , μεταξύ των ηλεκτρονίων των δυο ατόμων προκύπτει,

$$\begin{vmatrix} \langle H_0 + V^{1,2} \rangle_{11} - E & \langle V^{1,2} \rangle_{12} \\ \langle V^{1,2} \rangle_{21} & \langle H_0 + V^{1,2} \rangle_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

Οι ιδιοτιμές της ενέργειας που προκύπτουν είναι,

$$E_{\pm} = E_{mn} + K_{mn} \pm J_{mn} \quad (1.21)$$

με,

$$K_{mn} = \langle V^{1,2} \rangle_{11} = \int \Psi_n^*(\vec{r}_1)\Psi_m^*(\vec{r}_2)V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\Psi_n(\vec{r}_1)\Psi_m(\vec{r}_2)d^3(\vec{r}_1)d^3(\vec{r}_2) = \langle V^{1,2} \rangle_{22} \quad (1.22)$$

και

$$J_{mn} = \langle V^{1,2} \rangle_{12} = \int \Psi_n^*(\vec{r}_1)\Psi_m^*(\vec{r}_2)V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\Psi_n(\vec{r}_1)\Psi_m(\vec{r}_2)d^3(\vec{r}_1)d^3(\vec{r}_2) = \langle V^{1,2} \rangle_{21} \quad (1.23)$$

Λόγω της αλληλεπίδρασης Coulomb αίρεται ο εκφυλισμός. Οι κυματοσυναρτήσεις που διαγωνοποιούν την καινούρια Χαμιλτονιανή είναι οι,

$$\Psi^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 \pm \Psi_2) \quad (1.24)$$

$$\Psi^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2) \quad (1.25)$$

,που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές  $E^+$  και  $E^-$ . Εκτός από τις χωρικές κυματοσυναρτήσεις, πρέπει να συμπεριληφθεί και η κυματοσυνάρτηση του spin με έναν τέτοιο τρόπο, ώστε η ολική κυματοσυνάρτηση να είναι αντισυμμετρική. Οι κυματοσυναρτήσεις του spin δίνονται από τις σχέσεις,

$$X_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle](singlet, S = 0) \quad (1.26)$$

και

$$\left\{ \begin{array}{l} X_1^{-1} = |\downarrow\downarrow\rangle \\ X_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \\ X_1^1 = |\uparrow\uparrow\rangle \end{array} \right\} (triplet, S = 1). \quad (1.27)$$

Η singlet κυματοσυνάρτηση είναι αντισυμμετρική ως προς τις εναλλαγές των δυο σωματιδίων, ενώ οι triplet είναι συμμετρικές. Επομένως ισχύει ότι,

$$\Psi_{o\lambda}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2)X_0^0 \quad (1.28)$$

$$\Psi_{o\lambda}^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2)X_M^1 \quad (1.29)$$

όπου, η κυματοσυνάρτηση  $\Psi_{o\lambda}^+$  αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $E^+$  και η  $\Psi_{o\lambda}^-$  στην  $E^-$ . Ισχύει ότι,

$$\vec{S}_1\vec{S}_2 = \left\{ \begin{array}{l} -\frac{3}{4}, S = 0 \\ \frac{1}{4}, S = 1 \end{array} \right\} \quad (1.30)$$

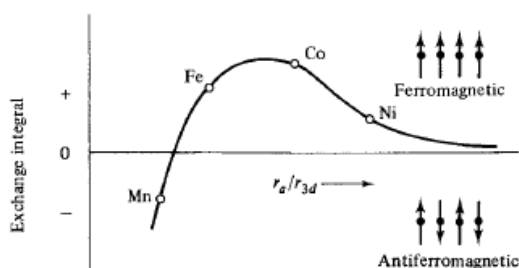
Οι ιδιοτιμές της ενέργειας, του συστήματος δυο αλληλοεπιδρώντων ατόμων, δίνονται από την σχέση,

$$E_{\pm} = (E + K - \frac{1}{2}J) - 2J\vec{S}_1\vec{S}_2 \quad (1.31)$$

με  $E = E_{mn}$  και  $K = K_{mn}$ . Ο τελευταίος όρος της Εξ.1.31 ονομάζεται ενέργεια ανταλλαγής δυο γειτονικών spins ( $S_1, S_2$ ),

$$E_{ex} = -2J_{at}\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \quad (1.32)$$

όπου  $J_{at}$  ( $J_{at} = J$ ) είναι το ολοκλήρωμα (ή σταθερά) ανταλλαγής. Ο όρος "ανταλλαγή" προκύπτει από την ευρηματική υπόθεση του Heisenberg πως δύο ηλεκτρόνια γειτονικών ατόμων δεν είναι πρακτικά διακριτά μεταξύ τους αφού υπάρχει η πιθανότητα να αλλάξουν θέση και "μητρικό" πυρήνα. Το μέτρο του ολοκληρώματος ανταλλαγής φθίνει εκθετικά με την απόσταση. Για  $J_{at} > 0$ , η χαμηλότερη ενέργεια του συστήματος είναι η  $E^-$  ( $S = 1$ ), που αντιστοιχεί σε διάταξη ομοπαράλληλων spin. Η διάταξη αυτή ονομάζεται σιδηρομαγνητική. Για  $J_{at} < 0$ , η χαμηλότερη ενέργεια του συστήματος αντιστοιχεί σε διάταξη αντιπαράλληλων spin, που ονομάζεται αντισιδηρομαγνητική. Επομένως, οι αλληλεπιδράσεις αυτές σχετίζονται άμεσα με το σχετικό προσανατολισμό δυο γειτονικών spins. Οι Bethe-Slater θεωρώντας τα δυο γειτονικά άτομα σφαιρικής συμμετρίας και πως βρίσκονται σε επαφή υπολόγισαν την σταθερά ανταλλαγής συναρτήσε του λόγου  $r_a/r_{3d}$ , με  $r_a$  την ενδοατομική απόσταση και  $r_{3d}$  την ακτίνα των 3d ατομικών τροχιακών, (ο σιδηρομαγνητισμός οφείλεται στα 3d ατομικά τροχιακά) σε διαφορετικά υλικά, διακρίνοντας με επιτυχία τα σιδηρομαγνητικά μέταλλα (Σχ.1.2). Οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής εξαρτώνται



Σχήμα 1.2: Σταθερά ανταλλαγής συναρτήσε του λόγου  $r_a/r_{3d}$  με  $r_a$  την ενδοατομική απόσταση και  $r_{3d}$  την ακτίνα των 3d ατομικών τροχιακών. Τα στοιχεία που βρίσκονται πάνω από τον οριζόντιο άξονα είναι σιδηρομαγνητικά (Διάγραμμα Bethe-Slater).

κυρίως από τις διατομικές αποστάσεις και όχι από την γεωμετρική συμμετρία των ατομικών θέσεων. Η κρυσταλλικότητα επομένως δεν αποτελεί προϋπόθεση για την παρατήρηση σιδηρομαγνητισμού (ή αντισιδηρομαγνητισμού).

### 1.2.2 Αλληλεπιδράσεις Dzialoshinskii - Moriya

Η ύπαρξη των αλληλεπιδράσεων Dzialoshinskii-Moriya (DM) [8, 9] προτάθηκε αρχικά από τον Dzialoshinskii για να ερμηνεύσει τις μαγνητικές ιδιότητες μη-κεντροσυμμετρικών συστημάτων, όπως το  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  [10]. Η θεωρητική ερμηνεία των ιδιοτήτων αυτών έγινε από τον Moriya, που προσέθεσε τον αντισυμμετρικό

όρο των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής στους υπολογισμούς, ως απόρροια της σύζευξης spin-τροχιάς μεταξύ γειτονικών spins σε συστήματα που παρουσιάζουν έλλειψη συμμετρίας αντιστροφής [9]. Συγκεκριμένα, θεωρώντας τις αδιατάρακτες κυματοσυναρτήσεις  $\Psi_n$  και τη σύζευξη spin-τροχιάς ως διαταρακτικό όρο προκύπτει για την ενέργεια σε προσέγγιση δεύτερης τάξης,

$$E^{(2)} = \sum_m \left[ \frac{\langle n | \lambda \vec{L}_1 \cdot \vec{S}_1 | m \rangle 2J(mn'n'n') \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}{E_n - E_m} + \frac{2J(nn'mn') \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \langle m | \lambda \vec{L}_1 \cdot \vec{S}_1 | n \rangle}{E_n - E_m} \right] + \sum_{m'} \left[ \frac{\langle n' | \lambda \vec{L}_2 \cdot \vec{S}_2 | m' \rangle 2J(m'n'n'n) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}{E_{n'} - E_{m'}} + \frac{2J(n'nmm') \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \langle m' | \lambda \vec{L}_2 \cdot \vec{S}_2 | n' \rangle}{E_{n'} - E_{m'}} \right] \quad (1.33)$$

όπου  $n, n'$  είναι οι βασικές καταστάσεις και  $m, m'$  οι διεγερμένες καταστάσεις των ατόμων 1 και 2 στις θέσεις  $R, R'$  αντίστοιχα.  $J(nn'mm')$  είναι το γνωστό ολοκλήρωμα ανταλλαγής,

$$J_{nn'mm'} = \int \Psi_n^*(\vec{r}_1 - \vec{R}) \Psi_{n'}^*(\vec{r}_2 - \vec{R}) V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \Psi_m(\vec{r}_2 - \vec{R}) \Psi_{m'}(\vec{r}_1 - \vec{R}) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (1.34)$$

. Αν η κυματοσυναρτηση  $\Psi_n$  δεν είναι εκφυλισμένη, η τροχιακή στροφορμή  $\vec{L}$  είναι φανταστικός αριθμός και επομένως η ενέργεια υπολογίζεται από τη σχέση,

$$E^{(2)} = 2\lambda \sum_m \frac{J(nn'mn')}{E_n - E_m} \langle n | \vec{L}_1 | m \rangle \cdot [\vec{S}_1, (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)] + 2\lambda \sum_{m'} \frac{J(nn'nmm')}{E_{n'} - E_{m'}} \langle n' | \vec{L}_2 | m' \rangle \cdot [\vec{S}_2, (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)] \\ = 2i\lambda \left[ \sum_m \frac{J(nn'mn')}{E_n - E_m} \langle n | \vec{L}_1 | m \rangle - \sum_{m'} \frac{J(nn'nmm')}{E_{n'} - E_{m'}} \langle n' | \vec{L}_2 | m' \rangle \right] \cdot [(\vec{S}_1 \times \vec{S}_2)] \quad (1.35)$$

Η ενέργεια γράφεται στη μορφή,

$$E_{DMI} = \vec{d}_{at} \cdot (\hat{S}_1 \times \hat{S}_2) \quad (1.36)$$

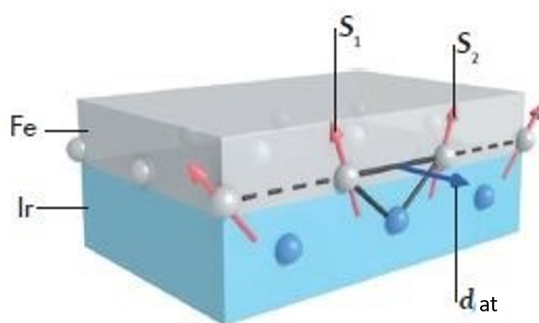
όπου  $\hat{S}_1, \hat{S}_2$  είναι γειτονικά spins και  $\vec{d}_{at}$  είναι το διάνυσμα DMI.

Σε συστήματα που παρουσιάζουν έλλειψη συμμετρίας αντιστροφής, η σύζευξη spin - τροχιάς (spin orbit coupling) προκαλεί, λοιπόν, αντισυμμετρική αλληλεπίδραση ανταλλαγής. Η αλληλεπίδραση DM είναι χειρόμορφη αλληλεπίδραση που ελαττώνει ή αυξάνει την ολική ενέργεια ενός συστήματος spins ανάλογα με τη φορά περιστροφής του κάθε spin από το γειτονικό του. Αν αρχικά τα δυο γειτονικά spins



είναι παράλληλα τότε ισχυρή αλληλεπίδραση DM (συγκριτικά με την αλληλεπίδραση ανταλλαγής) θα οδηγήσει σε μια μικρή κλίση των spins γύρω από το διάνυσμα  $\vec{d}_{at}$ . Σε επιφανειακά μαγνητικά συστήματα όπως τα διστρωματικά υμένα Fe/Ir, το διάνυσμα  $\vec{d}_{at}$  είναι προσανατολισμένο εντός του επιπέδου και οδηγεί σε κάθετο προσανατολισμό των γειτονικών spins.

Για τα μεταλλικά συστήματα, η ύπαρξη χειρόμορφων αλληλεπιδράσεων παρατηρήθηκε αρχικά σε άτακτα κράματα όπου κάποιο άτομο με ισχυρή σύζευξη spin-τροχιάς μεταβιβάζει την αλληλεπίδραση DM σε δυο γειτονικά άτομα. Στην περίπτωση αυτή το διάνυσμα  $\vec{d}_{at}$  είναι κάθετο στο επίπεδο του τριγώνου που σχηματίζουν τα τρία άτομα. Ίδιας συμμετρίας αλληλεπιδράσεις DM παρατηρούνται σε ετεροδομές μαγνητικών υμενίων / βαρέος μετάλλου που φέρουν ισχυρή σύζευξη spin - τροχιάς. Όπως φαίνεται και στο Σχ.1.3, οι αλληλεπιδράσεις DM σε αυτά τα



Σχήμα 1.3: Σχηματική αναπαράσταση της αλληλεπίδρασης DM μεταξύ γειτονικών ατόμων στην διεπιφάνεια σιδηρομαγνητικού film-βαρέος μετάλλου σε ετεροδομή Fe/Ir. Το διάνυσμα  $\vec{d}_{at}$  είναι κάθετο στο επίπεδο του τριγώνου που σχηματίζουν τα σιδηρομαγνητικά spins με τα άτομα του βαρέος μετάλλου [10].

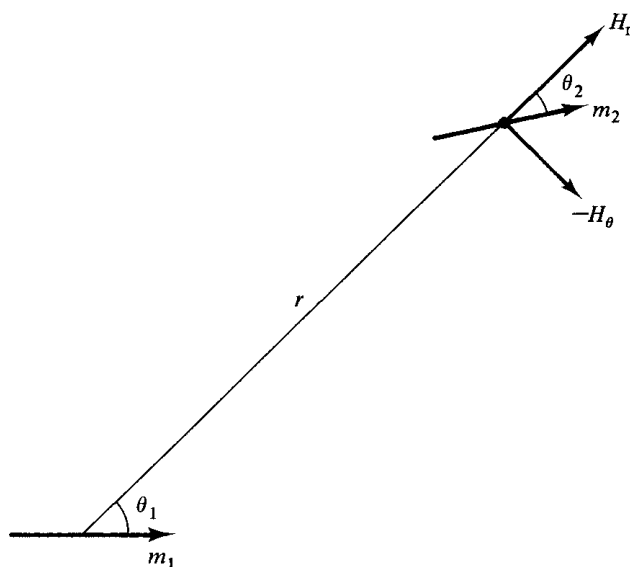
συστήματα είναι επιφανειακές. Η ισχύς τους εξαρτάται κυρίως από τη σχετική θέση των 3d καταστάσεων του μετάλλου μετάβασης και των τροχιακών 5d του βαρέος μετάλλου. Συγκεκριμένα, οι αλληλεπιδράσεις DM είναι ασθενείς όταν οι καταστάσεις 5d βρίσκονται χαμηλότερα στο ενεργειακό φάσμα από τις καταστάσεις 3d. Επομένως, υπάρχει η δυνατότητα ελέγχου της ισχύος των αλληλεπιδράσεων αυτών επιλέγοντας κατάλληλα το υλικό του βαρέος μετάλλου το οποίο συζευγνύεται με το σιδηρομαγνητικό υλικό, έτσι ώστε να ικανοποιείται αυτή η συνθήκη.

### 1.2.3 Διπολικές αλληλεπιδράσεις

Η ισχύς του μαγνητικού πεδίου ενός μαγνήτη με πόλους ισχύος  $p$  και μήκος  $l$ , σε απόσταση  $r \gg l$  από τον μαγνήτη, εξαρτάται από την ροπή  $p \cdot l$  του μαγνήτη και όχι ανεξάρτητα από την ισχύ  $p$  ή από το μήκος  $l$ . Επομένως, αν αυξηθεί η ισχύς και ελαττωθεί το μήκος του μαγνήτη, το εξωτερικό πεδίο παραμένει σταθερό. Κατά αυτή την έννοια, αν συνεχίσουμε να μικραίνουμε το μήκος του μαγνήτη, μπορούμε να καταλήξουμε σε ένα πολύ μικρό σύστημα, που ονομάζεται μαγνητικό δίπολο [3]. Η μαγνητοστατική ενέργεια δύο αλληλεπιδρώντων διπόλων υπολογίζεται από τη σχέση,

$$E_D = -g_{at} \frac{\cos(\theta_1 - \theta_2) - 3 \cos \theta_1 \cdot \cos \theta_2}{(r/a)^3}. \quad (1.37)$$

όπου  $g_{at} = \frac{\mu_0 \mu_s^2}{4\pi a^3}$  είναι η ισχύς της αλληλεπίδρασης μεταξύ δυο διπόλων και  $\theta_1, \theta_2$  οι γωνίες που σχηματίζουν οι μαγνητικές ροπές με την ακτινική συνιστώσα  $H_r$  του εξωτερικού πεδίου. Οι διπολικές αλληλεπιδράσεις είναι άπειρης εμβέλειας ( $E_D \sim \frac{1}{r^3}$ ).



Σχήμα 1.4: Αλληλεπιδρώντα δίπολα  $m_1$  και  $m_2$  που σχηματίζουν γωνίες  $\theta_1$  και  $\theta_2$  με την ακτινική διεύθυνση του εξωτερικού πεδίου του δίπολου  $H$ , αντίστοιχα. Η απόσταση μεταξύ των δυο διπόλων είναι  $r$ .

### 1.2.4 Μαγνητική ανισοτροπία

Σε κάθε υλικό υπάρχουν καθορισμένοι άξονες συμμετρίας, όπου ελαχιστοποιείται η ενέργεια του συστήματος, αν η μαγνήτιση είναι προσανατολισμένη παράλληλα με αυτούς [3, 11]. Για να στραφεί η μαγνήτιση ως προς αυτούς τους άξονες (έστω κατά γωνία  $\theta$ ), απαιτείται ενέργεια που ονομάζεται ενέργεια ανισοτροπίας. Υπάρχουν διάφορες αιτίες προέλευσης μαγνητικής ανισοτροπίας σε μαγνητικά υλικά. Η πιο συνηθισμένη αιτία εμφάνισης ανισοτροπίας είναι η αλληλεπίδραση των μαγνητικών ροπών spin με την τροχιακή στροφορμή που οδηγεί στην λεγόμενη κρυσταλλική ανισοτροπία. Η ενέργεια κρυσταλλικής ανισοτροπίας υπολογίζεται προσεγγιστικά από τη σχέση,

$$E_{an} = K_{at} \sin^2 \theta. \quad (1.38)$$

Όπως μπορούμε να διαπιστώσουμε, η ενέργεια κρυσταλλικής ανισοτροπίας εξαρτάται μόνο από την γωνία  $\theta$  που σχηματίζεται μεταξύ της τοπικής μαγνήτισης και του άξονα εύκολης μαγνήτισης. Για αυτό το λόγο αναφέρεται και ως μονοαξονική ανισοτροπία. Άλλοι παράγοντες που οδηγούν σε μαγνητική ανισοτροπία είναι οι παραμορφωτικές τάσεις που προκαλούν θλίψεις και εφελκυσμούς στο κρυσταλλικό πλέγμα. Επίσης, η παρουσία (ελεύθερων ή εσωτερικών) επιφανειών σε ένα δείγμα κρυστάλλου και η μειωμένη συμμετρία του συστήματος σε αυτές τις περιοχές, οδηγεί στη λεγόμενη επιφανειακή ανισοτροπία. Ένας αρκετά καθοριστικός παράγοντας σχηματισμού ανισοτροπίας στα νανομαγνητικά υλικά είναι το σχήμα του πεπερασμένου μαγνητικού δείγματος που επιβάλλει συγκεκριμένη μορφή για το απομαγνητίζον πεδίο, το οποίο καθορίζει την κατεύθυνση της μαγνήτισης του δείγματος και οδηγεί στη λεγόμενη ανισοτροπία σχήματος.

### 1.2.5 Ενέργεια Zeeman

Μια ατομική μαγνητική ροπή  $\vec{\mu}$ , κατά την ανταπόκρισή της σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο  $\vec{H}$ , δέχεται μηχανική ροπή  $\vec{F} = \vec{\mu} \times \vec{B}$  που την περιστρέφει έτσι ώστε να ευθυγραμμιστεί με το εξωτερικό πεδίο [3]. Η μαγνητοστατική ενέργεια που περιγράφει την αλληλεπίδραση αυτή ονομάζεται ενέργεια Zeeman και υπολογίζεται από τη σχέση

$$E_Z = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (1.39)$$

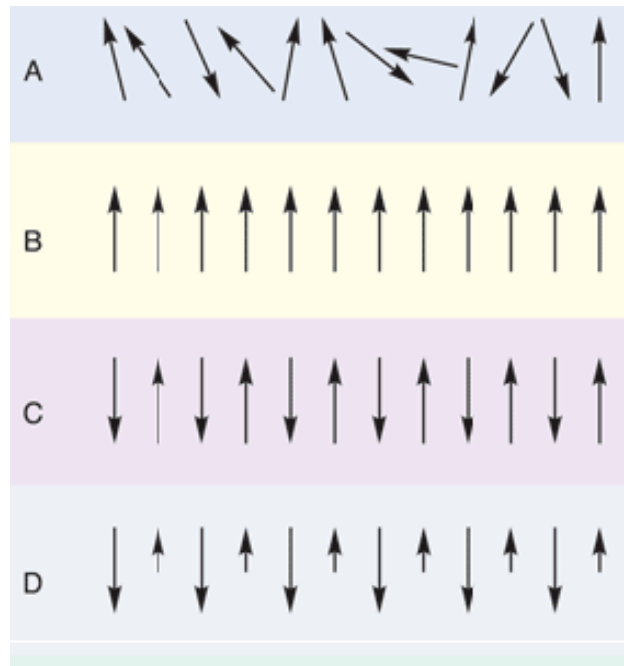
### 1.3 Μαγνητική διάταξη και μαγνητικές περιοχές

Μεταξύ των μαγνητικών ροπών ενός μαγνητικού υλικού, αναπτύσσονται ισχυρές αλληλεπιδράσεις (ανταλλαγής) [1, 2, 3, 4]. Αποτέλεσμα αυτών των αλληλεπιδράσεων, είναι η δημιουργία μιας συλλογικής ευθυγράμμισης των μαγνητικών ροπών, ακόμα και απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, με την προϋπόθεση η θερμοκρασία να βρίσκεται κάτω από μια κρίσιμη τιμή ( $T_c$ ). Τα υλικά που παρουσιάζουν τέτοια φαινόμενα μαγνητικής τάξης, χωρίζονται σε κατηγορίες που χαρακτηρίζονται από τη μορφή διάταξης των ροπών. Οι τρεις πιο γνωστές μορφές διάταξης είναι, η σιδηρομαγνητική, η αντισιδηρομαγνητική και η σιδηριμαγνητική.

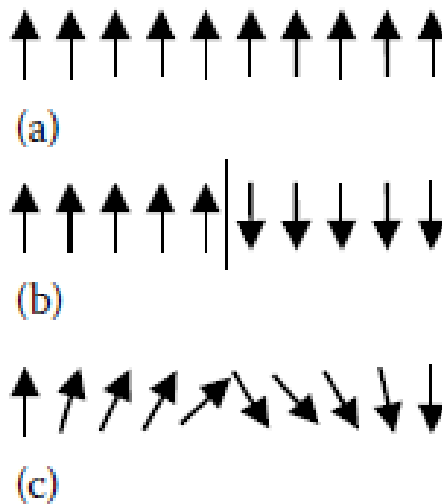
Σιδηρομαγνητικά, ονομάζονται τα υλικά που οι μαγνητικές τους ροπές είναι ομοπαράλληλες. Τα υλικά αυτά, παρουσιάζουν αυθόρμητη μαγνήτιση (για θερμοκρασίες μικρότερες της κρίσιμης), ενώ κάτω από την επίδραση ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, το μέτρο της μαγνήτισης τους ξεπερνά κατά πολλές τάξεις μεγέθους εκείνο των παραμαγνητικών υλικών. Τα απλούστερα σιδηρομαγνητικά υλικά είναι τα μέταλλα μετάβασης (Fe, Co, Ni) καθώς και κράματά τους. Αντισιδηρομαγνητικά, ονομάζονται τα υλικά που οι μαγνητικές ροπές των ατόμων τους είναι αντιπαράλληλες. Τα υλικά αυτά, δεν παρουσιάζουν αυθόρμητη μαγνήτιση και ανταποκρίνονται δύσκολα στα εξωτερικά μαγνητικά πεδία. Τέτοια υλικά είναι το Χρώμιο (Cr), το Δημήτριο (Ce) και το Νεοδύμιο (Nd). Τέλος, αν οι μαγνητικές ροπές των ατόμων ενός υλικού είναι αντιπαράλληλες αλλά έχουν διαφορετικά μέτρα, τότε το υλικό ονομάζεται σιδηριμαγνητικό και παρουσιάζει μη μηδενική μαγνήτιση. Τέτοια υλικά είναι τα διάφορα οξείδια των μετάλλων μετάβασης ( $Fe_2O_3$ , NiO, CoO). Οι διάφορες μορφές μαγνητικής διάταξης απεικονίζονται στο Σχ. 1.5.

Τα σιδηρομαγνητικά υλικά, σε μακροσκοπικά δείγματα απουσία εξωτερικού πεδίου, είναι απομαγνητισμένα. Για να εξηγήσει το φαινόμενο αυτό ο Weiss (1907), θεώρησε πως τα υλικά, είναι χωρισμένα σε περιοχές με μαγνήτιση προσανατολισμένη σε τυχαία διεύθυνση. Τις περιοχές αυτές τις ονόμασε μαγνητικές περιοχές (magnetic domains).

Ο διαχωρισμός των μαγνητικών περιοχών δεν γίνεται απότομα, αλλά με έναν συνεχή τρόπο (Σχ. 1.6). Αυτό συμβαίνει, καθώς, η απότομη αλλαγή του spin από την μία περιοχή στην άλλη θα απαιτούσε μεγάλη ενέργεια, εξαιτίας των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής. Το τοίχωμα, λοιπόν, μεταξύ δυο μαγνητικών περιοχών δεν είναι απειροστά μικρό, αλλά έχει κάποιο πεπερασμένο πάχος και ονομάζεται μαγνητικό τοίχωμα.



Σχήμα 1.5: Μορφές μαγνητικής διάταξης: A. Παραμαγνητισμός B. Σιδηρομαγνητισμός C. Αντισιδηρομαγνητισμός D. Σιδηριμαγνητισμός



Σχήμα 1.6: Μονοδιάστατο σύστημα σιδηρομαγνητικού υλικού: (a) σιδηρομαγνητική διάταξη, (b) γειτονικές μαγνητικές περιοχές, (c) σταδιακή μετάβαση από τη μια μαγνητική περιοχή στην άλλη (μαγνητικό τοίχωμα).

Η μεταβολή του spin κατά μια μικρή γωνία  $\phi$  οδηγεί σε αύξηση της ενέργειας ανταλλαγής κατά  $JS^2\phi^2$ . Επομένως, για να στραφεί το spin κατά γωνία  $\phi = \pi/N$ ,

απαιτείται ενέργεια  $JS^2(\pi/N)^2$ . Η ενέργεια που απαιτείται για να στραφεί η μαγνήτιση κατά γωνία  $\pi$ , δηλαδή να πραγματοποιηθούν και οι  $N$  στροφές είναι,

$$E_{ex} = NJS^2\left(\frac{\pi}{N}\right)^2 = \frac{JS^2\pi^2}{N} \quad (1.40)$$

Η ενέργεια του τοιχώματος ανά μονάδα επιφάνειας δίνεται από την σχέση,

$$\epsilon = \frac{JS^2\pi^2}{Na^2} + KNa \quad (1.41)$$

όπου  $a$  είναι η πλεγματική σταθερά. Η ενέργεια αυτή γίνεται ελάχιστη όταν,

$$N = \left(\frac{JS^2\pi^2}{Ka^3}\right)^{1/2} \quad (1.42)$$

Το εύρος του μαγνητικού τοιχώματος υπολογίζεται από τη σχέση,

$$d = Na = \left(\frac{JS^2\pi^2}{Ka}\right)^{1/2} \quad (1.43)$$

είναι, δηλαδή, αντιστρόφως ανάλογο της ρίζας της μαγνητικής ανισοτροπίας. Κατά συνέπεια, είναι μεγάλο σε μαλακά μαγνητικά υλικά (μικρό  $K$ ) και μικρό σε σκληρά μαγνητικά υλικά (μεγάλο  $K$ ). Τυπικά μεγέθη μαγνητικού τοιχώματος είναι 10 nm έως 1  $\mu$ m.

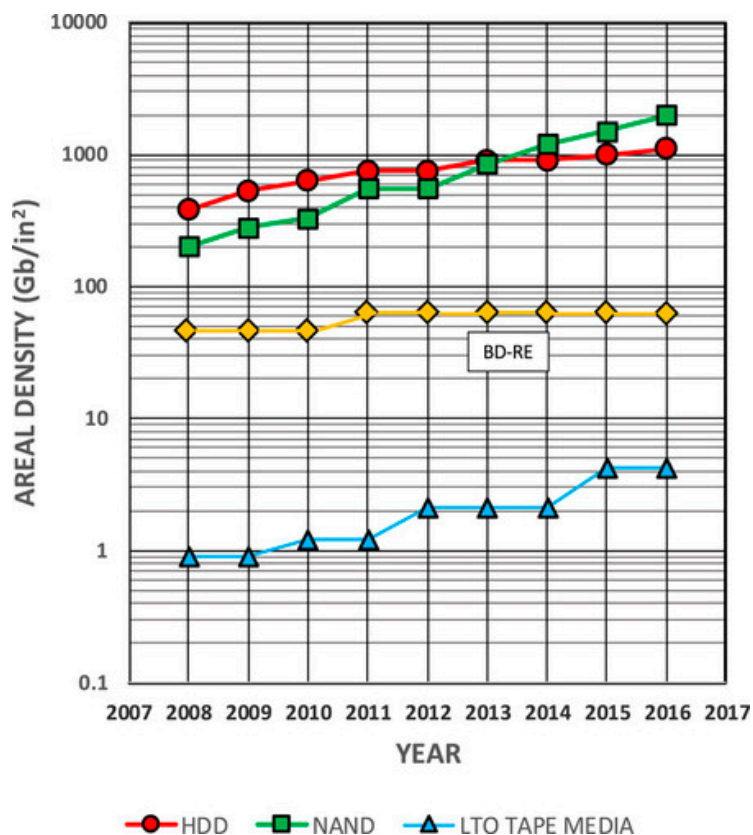
## 1.4 Νανομαγνητισμός - Σπιντρονική

Ο Νανομαγνητισμός [12] είναι ο κλάδος της Φυσικής που μελετά μαγνητικά υλικά των οποίων τουλάχιστον μία εκ των διαστάσεων τους βρίσκεται στη νανοκλίμακα (1nm - 100nm). Εξαιτίας του χωρικού περιορισμού αυτού, οι διαστάσεις των νανοϋλικών προσεγγίζουν χαρακτηριστικά μήκη συσχέτισης των συστημάτων, όπως η εμβέλεια των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής και των διπολικών αλληλεπιδράσεων, γεγονός που επηρεάζει σημαντικά τις μαγνητικές τους ιδιότητες. Τα νανομαγνητικά υλικά παρουσιάζουν σημαντική αναλογία επιφάνειας / όγκου σε αντίθεση με τα συμβατικά υλικά. Επίσης, ατέλειες της περιοδικότητας του κρυστάλλου, όπως τα πλεγματικά κενά και η (ενδο)επιφανειακή τραχύτητα μπορούν να αποδειχθούν καθοριστικοί παράγοντες διαμόρφωσης της μαγνητικής τους συμπεριφοράς. Τέλος, οι θερμικές διακυμάνσεις διαφοροποιούν πολύ τη δυναμική

αυτών των συστημάτων και αναδεικνύουν νέα φαινόμενα όπως ο υπερπαραμαγνητισμός [13]. Οι φυσικές ιδιότητες των νανομαγνητικών υλικών διαφέρουν, λοιπόν, σημαντικά από εκείνες των συμβατικών μαγνητικών υλικών. Οι κυριότερες κατηγορίες νανομαγνητικών υλικών είναι τα μαγνητικά νανοσωματίδια, τα μαγνητικά νανοσύρματα, τα λεπτά υμένια και τα πολυστρωματικά συστήματα.

Οι τεχνολογικές εφαρμογές που προκύπτουν από νανομαγνητικά υλικά ποικίλουν. Σημαντικές είναι οι εφαρμογές τους στην βιολογία και την ιατρική καθώς μαγνητικά νανοσωματίδια χρησιμοποιούνται σε διαγνωστικές και θεραπευτικές μεθόδους με κυριότερη την αξιοποίησή τους στη θεραπεία του καρκίνου. Συγκεκριμένα, με τη χρήση μαγνητικών νανοσωματιδίων, μπορεί να επιτευχθεί τοπική δράση των αντικαρκινικών φαρμάκων σε επιλεγμένους ιστούς. Αποτέλεσμα είναι η σημαντική μείωση των παράπλευρων επιπτώσεων των μεθόδων χημειοθεραπείας (εξασθένηση ανοσοποιητικού κτλ). Επίσης, τα καρκινικά κύτταρα είναι ιδιαίτερα ευπαθή στην αύξηση της θερμοκρασίας. Νανοσωματίδια μπορούν να τοποθετηθούν στην περιοχή των καρκινικών κυττάρων και μέσω της εφαρμογής εξωτερικού εναλλασσόμενου μαγνητικού πεδίου, να επιτευχθεί εκπομπή θερμότητας με αποτέλεσμα την καταστροφή τους (υπερθερμία) [14]. Οι περισσότερες όμως εφαρμογές των νανομαγνητικών υλικών έχουν επιτευχθεί στη μηχανική των υπολογιστών. Η τεχνολογία μαγνητικής αποθήκευσης εξελίχθηκε με ραγδαίους ρυθμούς τις τελευταίες δεκαετίες, γεγονός που αποτυπώνεται ευκρινώς στο σχήμα (Σχ.1.7) [15]. Η αύξηση της μαγνητικής μνήμης τα τελευταία χρόνια οφείλεται στην ανάπτυξη των μαγνητικών νανοσωματιδίων και των λεπτών υμενίων, που αποτελούν πλέον βασικό υλικό κατασκευής των σκληρών δίσκων και των μαγνητικών κεφαλών ανάγνωσης.

Πέρα όμως από τις διατάξεις μαγνητικής αποθήκευσης, νανομαγνητικά υλικά χρησιμοποιούνται και στην ανάπτυξη τεχνολογικά νέων υπολογιστικών συστημάτων που βασίζονται σε εφαρμογές της Σπιντρονικής [16]. Η Σπιντρονική αναφέρεται στον επιστημονικό κλάδο όπου η μαγνητική ροπή (spin) των φορέων ηλεκτρικού φορτίου (και όχι το φορτίο) χρησιμοποιείται στην αποθήκευση, επεξεργασία και μεταφορά ψηφιακής πληροφορίας. Η έρευνα στην Σπιντρονική ξεκίνησε με τις πρωτοποριακές μελέτες του Berger [17, 18] που έδειξε πως ηλεκτρικοί παλμοί ρεύματος μπορούν να μετακινήσουν μαγνητικά τοιχώματα σε λεπτά σιδηρομαγνητικά υμένια. Το 1986 βραβεύτηκαν με το Nobel Φυσικής δυο διαφορετικές ερευνητικές ομάδες (Grunberg *et al*, Fert *et al*) μετά την παράλληλη ανακάλυψη του φαινομένου της γιγαντιαίας μαγνητοαντίστασης (GMR) [19, 20]. Σύμφωνα με το



Σχήμα 1.7: Χρονική εξέλιξη της επιφανειακής πυκνότητας των διατάξεων μαγνητικής αποθήκευσης [15]. Παρατηρείται συστηματική αύξηση της μαγνητικής μνήμης.

φαινόμενο αυτό, παρατηρείται πολύ υψηλή αντίσταση σε πολυστρωματικές δομές σιδηρομαγνητικού μετάλλου / μετάλλου / σιδηρομαγνητικού μετάλλου, όταν τα δυο μαγνητικά στρώματα είναι συζευγμένα μεταξύ τους αντισιδηρομαγνητικά και πολύ χαμηλή αντίσταση όταν είναι συζευγμένα σιδηρομαγνητικά. Ενδιάμεσες τιμές αντίστασης μεταξύ αυτών των δυο ακραίων τιμών επιτυγχάνονται σε ενδιάμεσες γωνίες των μαγνητίσεων των δυο σιδηρομαγνητικών στρωμάτων, δίνοντας έτσι τη δυνατότητα να αξιοποιηθεί αυτή η διάταξη ως διακόπτης ηλεκτρικού ρεύματος. Τέλος, νέες προοπτικές τα τελευταία χρόνια έδωσε η πρόταση του Parkin [21] για αποθήκευση ψηφιακής πληροφορίας σε διαδοχικά μαγνητικά τοιχώματα μαγνητικών νανοσυρμάτων και μετακίνησή τους μέσω spin-πολωμένου ρεύματος (racetrack memory). Η πρόταση αυτή του Parkin άνοιξε το δρόμο για το σχεδιασμό πολλών νέων σπιντρονικών διατάξεων όπως το spin field effect transistor [22] και έδωσε το έναυσμα για τη μελέτη νέων διαμορφώσεων σολιτονικού χαρακτήρα (πέρα από τα μαγνητικά τοιχώματα) όπως τα μαγνητικά σκυρμιόνια (skyrmions)

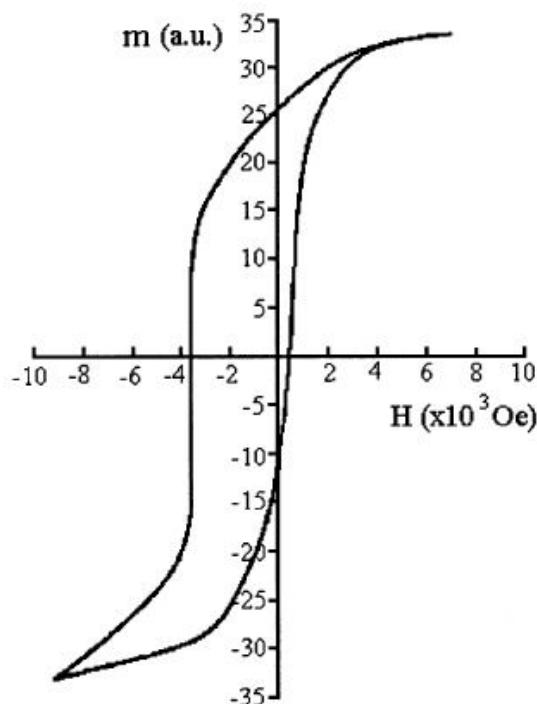


[10, 23], που μπορούν να παίξουν το ρόλο του φορέα ψηφιακής πληροφορίας. Σημαντικό τμήμα της έρευνας, λοιπόν, στην Σπιντρονική επικεντρώνεται στη μελέτη διαμορφώσεων σολιτονικού χαρακτήρα [24] που παρουσιάζουν μικρό μέγεθος, υψηλή ευστάθεια σε δομικές και θερμικές διαταραχές, χαμηλές τιμές κρίσιμου πολωμένου ρεύματος για την μετακίνησή τους και μεγάλη ευκινησία διάδοσης.

## 1.5 Φαινόμενο Πόλωσης - Ανταλλαγής

Σε μια προσπάθεια να αναπτυχθούν μαγνητικά υλικά με επιθυμητές ιδιότητες (αυξημένη ανισοτροπία), το Φαινόμενο Πόλωσης - Ανταλλαγής (ΦΠΑ) [25, 26, 27] έχει αναγνωρισθεί ως μέσο διαμόρφωσης των χαρακτηριστικών υστέρησης νανοδομημένων μαγνητικών υλικών [28, 29] και πρόσφατα βρίσκει εφαρμογές σε διατάξεις όπως οι μαγνητικές δίοδοι και οι βαλβίδες spin (spin valves) που αποτελούν στοιχεία των διατάξεων σπιντρονικής [30]. Το ΦΠΑ παρατηρείται όταν ένα σιδηρομαγνητικό και ένα αντισιδηρομαγνητικό υλικό βρίσκονται σε μαγνητική σύζευξη. Απαραίτητη προϋπόθεση για να παρατηρηθεί το φαινόμενο πειραματικά, είναι το σύστημα να βρίσκεται σε θερμοκρασία μικρότερη των κρίσιμων θερμοκρασιών των δυο υλικών ( $T < T_N < T_c$ ) που απαρτίζουν την ετεροδομή. Το φαινόμενο ανακαλύφθηκε το 1956 από τους Meiklejohn και Bean, όταν παρατήρησαν, μετά από ψύξη υπό πεδίο, μετατοπισμένο το βρόχο υστέρησης ενός συστήματος σωματιδίων Co (σιδηρομαγνητικό)- CoO (αντισιδηρομαγνητικό). Στο σχήμα Σχ.1.8 απεικονίζεται η μετατόπιση βρόχου υστέρησης οξειδωμένων νανοσωματιδίων Co μετά από ψύξη υπό πεδίο.

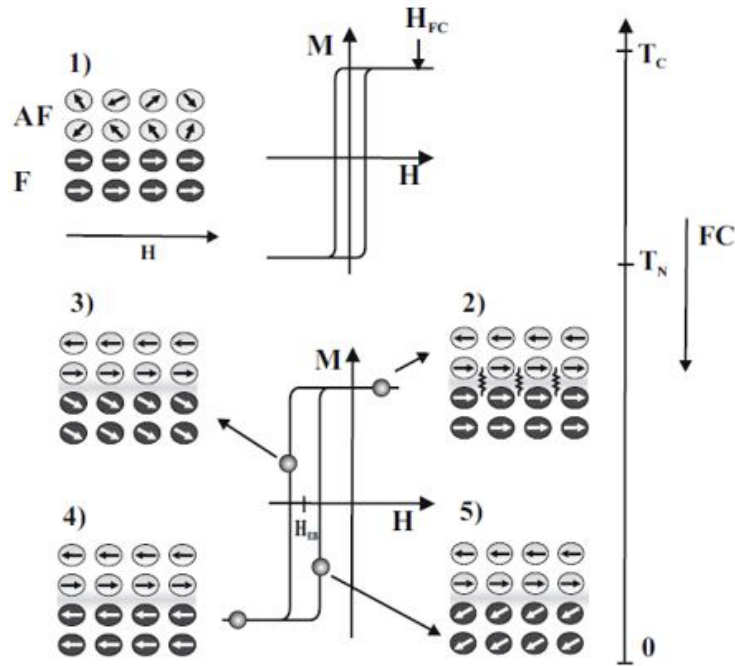
Η ποιοτική κατανόηση του φαινομένου, γίνεται μέσω της περιγραφής της δομής στην διεπιφάνεια των δυο μερών της ετεροδομής καθώς και της πειραματικής διαδικασίας [27, 31]. Αρχικά, το σύστημα ψύχεται σε θερμοκρασία  $T_N < T < T_c$ . Σε αυτή τη θερμοκρασία τα spins του σιδηρομαγνητικού υλικού διατάσσονται, ενώ το αντισιδηρομαγνητικό υλικό εμφανίζει παραμαγνητική συμπεριφορά. Ο βρόχος υστέρησης δεν παρουσιάζει καμία μετατόπιση, σχήμα Σχ.1.9. Στη συνέχεια, το σύστημα τοποθετείται εντός ισχυρού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, μέχρις ότου να επιτευχθεί στο σιδηρομαγνητικό υλικό μαγνήτιση κορεσμού και ψύχεται σε θερμοκρασία  $T < T_N < T_c$ . Τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, τώρα, διατάσσονται, ενώ λόγω της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής, το πρώτο μονοατομικό στρώμα στην διεπιφάνεια διατάσσεται παράλληλα (ή αντιπαράλληλα) με τα spins του σιδηρομαγνητικού υλικού. Στη συνέχεια, το μαγνητικό πεδίο αντιστρέφεται. Τα



Σχήμα 1.8: Διάγραμμα μαγνήτισης  $m$  συναρτήσει του εξωτερικού πεδίου  $H$  (βρόχος υστέρησης) συστήματος οξειδωμένων νανοσωματιδίων  $\text{Co}$ . Παρατηρείται μετατόπιση του βρόχου υστέρησης μετά από ψύξη σε θερμοκρασία  $T = 77 \text{ K}$ , υπό σταθερό εξωτερικό πεδίο  $H = 6 \text{ Oe}$  [32].

spins του σιδηρομαγνητικού υλικού, τείνουν να προσανατολιστούν ως προς το εξωτερικό πεδίο. Λόγω όμως της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής με τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, η περιστροφή τους απαιτεί μεγαλύτερη ενέργεια, με αποτέλεσμα το συνεκτικό πεδίο να είναι μεγαλύτερο. Αντίθετα, για την επαναφορά τους στην αρχική διεύθυνση απαιτείται μικρότερη ενέργεια, δηλαδή, το συνεκτικό πεδίο για θετικές τιμές του πεδίου είναι μικρότερο. Ο βρόχος υστέρησης του συστήματος, λοιπόν, εμφανίζεται μετατοπισμένος κατά ένα πεδίο  $H_{eb}$ , που ονομάζεται πεδίο πόλωσης ανταλλαγής. Πρέπει να σημειωθεί πως η προσέγγιση αυτή, υιοθετεί την υπόθεση πως οι ροπές του αντισιδηρομαγνητικού υλικού στην ενδοεπιφάνεια λειτουργούν ως ένα ενιαίο "παγωμένο" πεδίο που οδηγεί τελικά στη μετατόπιση του βρόχου υστέρησης. Παρά το γεγονός ότι η προσέγγιση αυτή ερμηνεύει τη μετατόπιση του βρόχου υστέρησης, αγνοεί την επίδραση των θερμικών διακυμάνσεων και της μικροσκοπικής δομής του αντισιδηρομαγνητικού υλικού στην ενδοεπιφάνεια.

Όπως γίνεται κατανοητό το ΦΠΑ είναι ένα επιφανειακό φαινόμενο που εξαρτά-



Σχήμα 1.9: Μικροσκοπική περιγραφή του Φαινομένου Πόλωσης Ανταλλαγής κατά την διαδικασία ψύξης υπό σταθερό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο  $H_{FC}$  [31]. Παρατηρούνται τα εξής στάδια, (1) οι μαγνητικές ροπές του σιδηρομαγνήτη διατάσσονται κατά τη φορά του πεδίου σε θερμοκρασία  $T < T_c$ , (2) το σύστημα ψύχεται σε θερμοκρασία  $T < T_N$  και οι μαγνητικές ροπές του αντισιδηρομαγνήτη διατάσσονται, (3) εφαρμόζεται πεδίο αντιστροφής, (4) οι μαγνητικές ροπές του σιδηρομαγνήτη αντιστρέφονται λόγω του εξωτερικού πεδίου, (5) εφαρμόζεται πεδίο επαναφοράς των μαγνητικών ροπών. Τα δυο πεδία που απαιτούνται για την αντιστροφή και επαναφορά των μαγνητικών ροπών δεν είναι ίσα λόγω της σύζευξης ανταλλαγής στη διεπιφάνεια και επομένως ο βρόχος μετατοπίζεται κατά πεδίο  $H_{eb}$ .

ται έντονα από την μικροσκοπική διάταξη των spins της ενδοεπιφάνειας της ετεροδομής. Η αύξηση του πάχους της σιδηρομαγνητικής περιοχής οδηγεί σε ελάττωση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής ( $H_{eb} \sim 1/t_{\Sigma\Delta}$ ), ενώ η εξάρτηση από το πάχος του φλοιού είναι πιο περίπλοκη. Αναγκαία συνθήκη για την παρατήρηση του φαινομένου είναι η ανισοτροπία του αντισιδηρομαγνητικού υλικού να είναι μεγαλύτερη από την ενδοεπιφανειακή ενέργεια ανταλλαγής ( $K_{A\Sigma}t_{A\Sigma} > J_{\Sigma\Delta-A\Sigma}$ ) [28].

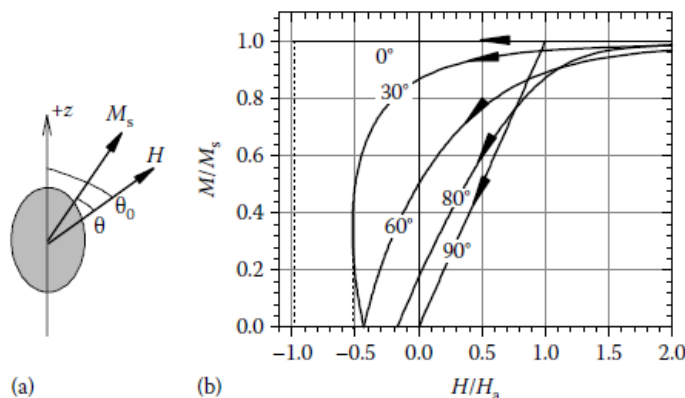
### 1.5.1 Μεσοσκοπικά μοντέλα μελέτης του Φαινομένου Πόλωσης - Ανταλλαγής

Σε αυτή την υποενότητα γίνεται αναφορά στα βασικότερα πρώιμα μεσοσκοπικά θεωρητικά μοντέλα μέσω των οποίων μελετήθηκε το φαινόμενο πόλωσης

- ανταλλαγής. Οι αναλυτικοί υπολογισμοί των μοντέλων αυτών αποτελούν επέκταση του μοντέλου των Stoner - Wohlfarth (S-W) [33] μέσω του οποίου πραγματοποιείται μελέτη σιδηρομαγνητικών νανοσυστημάτων, όπου κατά την περιστροφή οι μαγνητικές ροπές προσανατολίζονται στο πεδίο με ένα σύμφωνο τρόπο (coherent rotation). Για την πληρότητα του κεφαλαίου πραγματοποιείται αρχικά αναλυτική περιγραφή του μοντέλου αυτού και στη συνέχεια των μοντέλων μελέτης των διμαγνητικών συστημάτων.

### Το μοντέλο Stoner - Wohlfarth

Μελετάται σιδηρομαγνητικό νανοςύστημα ανισοτροπίας  $K$ , που αποτελείται από μια μόνο μαγνητική περιοχή με μαγνήτιση κόρου  $M_s$ . Ο  $z$  άξονας λαμβάνεται ως ο άξονας εύκολης μαγνήτισης του συστήματος. Το σύστημα τοποθετείται εντός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, που σχηματίζει γωνία  $\theta_0$  με τον  $z$  άξονα, ενώ η μαγνήτιση του συστήματος  $M_s$ , σχηματίζει γωνία  $\theta$  με το εξωτερικό πεδίο  $H$ , όπως φαίνεται στο Σχ.1.10(a) [33].



Σχήμα 1.10: (a) Απεικόνιση σιδηρομαγνητικού νανοςυστήματος μαγνήτισης κορεσμού  $M_s$ , ανισοτροπίας  $K$ , εντός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου  $H$  που σχηματίζει γωνία  $\theta_0$  με τον  $z$  άξονα (άξονα εύκολης μαγνήτισης) και γωνία  $\theta$  με τη μαγνήτιση κορεσμού. (b) Διάγραμμα μαγνήτισης συναρτήσει του εξωτερικού πεδίου για διάφορες διευθύνσεις του πεδίου, σύμφωνα με το μοντέλο S-W [33].

Η ενεργειακή πυκνότητα του συστήματος δίνεται από την σχέση,

$$\epsilon = -K \cos^2(\theta - \theta_0) - \mu_0 H M_s \cos(\theta) \quad (1.44)$$

Στην κατάσταση ισορροπίας ισχύει ότι,

$$\frac{d\epsilon}{d\theta} = 0 \Rightarrow 2K \sin(\theta - \theta_0) \cos(\theta - \theta_0) + \mu_0 H M_s \sin(\theta) = 0 \quad (1.45)$$

Εισάγοντας το αδιάστατο πεδίο  $h = H/H_a$  και το πεδίο ανισοτροπίας  $H_a = \frac{2K}{\mu_0 M_s}$  η εξίσωση μετασχηματίζεται στην,

$$\sin[2(\theta - \theta_0)] + 2h \sin(\theta) = 0 \quad (1.46)$$

Χρησιμοποιώντας τη μαγνήτιση  $m = \mu \cos(\theta)/V$ , η εξίσωση γράφεται ως εξής,

$$2m(1 - m^2)^{1/2} \cos(2\theta_0) + \sin(2\theta_0)(1 - 2m^2) + 2h(1 - m^2)^{1/2} = 0 \quad (1.47)$$

Από την τελευταία σχέση, υπολογίζεται η παραμένουσα μαγνήτιση ( $h=0$ ) και το συνεκτικό πεδίο ( $m=0$ ) του συστήματος. Προκύπτει ότι,

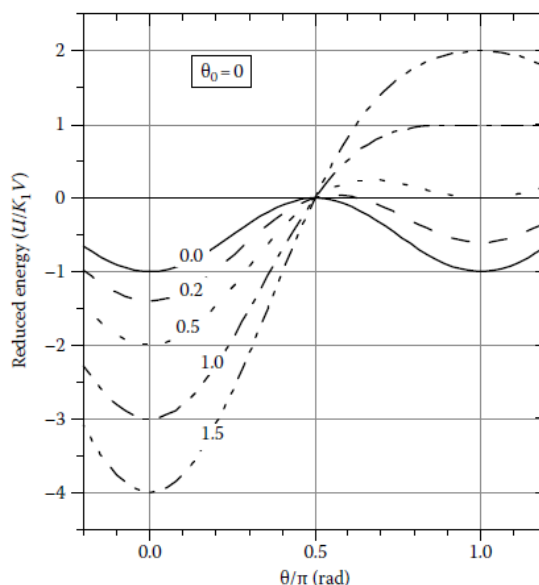
$$m_r = \cos(\theta_0) \quad (1.48)$$

και

$$h_c = \sin(\theta_0) \cos(\theta_0) \quad (1.49)$$

Στο σχήμα Σχ.1.10(b) απεικονίζεται ο βρόχος υστέρησης για διαφορετικές διευθύνσεις εξωτερικού πεδίου. Παρατηρείται πως όταν το εξωτερικό πεδίο είναι κάθετο στον άξονα εύκολης μαγνήτισης ( $\theta_0 = \pi/2$ ), το συνεκτικό πεδίο είναι μηδενικό και η μαγνήτιση παρουσιάζει γραμμική απόκριση στο πεδίο. Όταν το εξωτερικό πεδίο είναι παράλληλο ( $\theta_0 = 0$ ) με τον άξονα εύκολης μαγνήτισης, η μαγνήτιση παραμένει σταθερή, μέχρις ότου το πεδίο να γίνει ίσο με το φραγμό ανισοτροπίας του συστήματος. Τότε, παρατηρείται μία μη αντιστρεπτή μεταβολή της μαγνήτισης από  $m=1$  σε  $m=-1$ . Το πεδίο αυτό ονομάζεται πεδίο αντιστροφής ( $H_s$ , switching field).

Στο Σχ.1.11, απεικονίζεται το διάγραμμα της ολικής ενέργειας του συστήματος συναρτήσει της γωνίας  $\theta$ , για διάφορες τιμές του πεδίου  $h$ . Για μηδενικό εξωτερικό πεδίο, η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος έχει δυο ισοδύναμα ελάχιστα, που αντιστοιχούν στις δυο ισοδύναμες διευθύνσεις της μαγνήτισης ( $\theta = 0$  και  $\theta = \pi$ ). Καθώς το εξωτερικό πεδίο αυξάνει, η παράλληλη στο πεδίο διεύθυνση είναι η ενεργειακά προτιμητέα (ελάττωση της ενέργειας της κατάστασης για  $\theta = 0$ ). Μόλις το πεδίο γίνει ίσο με το πεδίο αντιστροφής ( $H = H_s$ ), το υψηλότερο



Σχήμα 1.11: Διάγραμμα της ολικής ενέργειας του συστήματος, συναρτήσει της γωνίας  $\theta_0$  που σχηματίζει το εξωτερικό πεδίο με τον z άξονα [11].

ενεργειακά ελάχιστο ( $\theta = \pi$ ) εξαφανίζεται και το σύστημα μεταβαίνει στο ελάχιστο που αντιστοιχεί στη διεύθυνση  $\theta = 0$ . Η κατάσταση, δηλαδή, στην οποία  $H = H_s$ , είναι κατάσταση ασταθούς ισορροπίας. Ισχύει ότι,

$$\frac{d\epsilon}{d\theta} = 0 \Rightarrow \sin[2(\theta - \theta_0)] + 2h \sin(\theta) = 0 \quad (1.50)$$

και

$$\frac{d^2\epsilon}{d\theta^2} = 0 \Rightarrow \cos[2(\theta - \theta_0)] \pm h \sin(\theta) = 0 \quad (1.51)$$

Από τις σχέσεις αυτές υπολογίζεται το πεδίο αντιστροφής. Προκύπτει,

$$h_s = \frac{H}{H_a} = (\cos^{2/3}(\theta_0) + \sin^{2/3}(\theta_0))^{-3/2} \quad (1.52)$$

Συγκρίνοντας τις σχέσεις Εξ.1.49 και Εξ.1.52, προκύπτει ότι μεταξύ των γωνιών  $\pi/4 < \theta_0 < \pi/2$ , το συνεκτικό πεδίο είναι μικρότερο του πεδίου αντιστροφής ( $h_c < h_s$ ). Αυτό σημαίνει, πως η μη αντιστρεπτή (irreversible) μεταβολή της μαγνήτισης από  $m=1$  σε  $m=-1$  συμβαίνει, όταν η γωνία που σχηματίζει το εξωτερικό πεδίο με τον άξονα εύκολης μαγνήτισης, είναι μεταξύ των τιμών  $0 < \theta_0 < \pi/4$ . Το φαινόμενο αυτό μπορούμε να το κατανοήσουμε και με το ακόλουθο παράδειγμα.

Θεωρούμε ένα σύστημα εντός εξωτερικού πεδίου  $h = h_c$ , έτσι ώστε η μαγνήτιση του να μηδενιστεί. Σβήνουμε το εξωτερικό πεδίο αδιαβατικά. Εάν  $h_c < h_s$ , τότε το σύστημα θα επανέρθει στην κατάσταση όπου  $m=1$ . Αντίθετα, εάν  $h_c > h_s$  η μαγνήτιση του συστήματος θα μεταβληθεί σε  $m = -1$  (μη-αντιστρεπτή μεταβολή).

### Το μοντέλο Meiklejohn - Bean

Οι Meiklejohn και Bean επέκτειναν το μοντέλο των Stoner - Wohlfarth και κατασκεύασαν ένα φαινομενολογικό μοντέλο, για τον υπολογισμό του πεδίου πόλωσης - ανταλλαγής [25, 26], σε διμαγνητικά νανοσυστήματα. Η περιγραφή του συστήματος βασίστηκε στις υποθέσεις πως τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού στη διεπιφάνεια, έχουν την ίδια κατεύθυνση δημιουργώντας μια επιφανειακή μαγνητική ροπή (uncompensated spins) που λειτουργεί ως ένα ενιαίο "παγωμένο" πεδίο. Ακόμα, τα δυο μέρη της ετεροδομής δεν εμφανίζουν μαγνητικές περιοχές και το αντισιδηρομαγνητικό υλικό δεν ανταποκρίνεται στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Κατά την ανταπόκριση τους σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, τα spins του σιδηρομαγνητικού υλικού περιστρέφονται σύμφωνα (coherent rotation). Το σύστημα απεικονίζεται στο Σχ.1.12.

Η ενεργειακή πυκνότητα του συστήματος είναι,

$$\epsilon = -\mu_0 H M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta} \cos(-\beta) + K_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta} \sin^2(\beta) - J_{eb} \cos(\beta) \quad (1.53)$$

όπου, ο πρώτος όρος είναι ο όρος Zeeman, ο δεύτερος η ενέργεια ανισοτροπίας του σιδηρομαγνήτη και ο τρίτος όρος είναι η ενέργεια ανταλλαγής μεταξύ των δύο φάσεων και  $t_{\Sigma\Delta}$  το πάχος του δείγματος του σιδηρομαγνητικού υλικού. Εφαρμόζοντας τη συνθήκη ισορροπίας προκύπτει ότι,

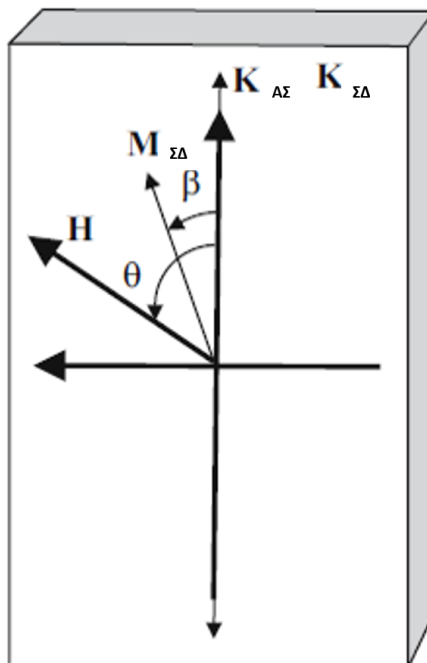
$$\frac{d\epsilon}{d\theta} = 0 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \beta = \arccos\left(\frac{J_{eb} - \mu_0 H M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}}{2K_{\Sigma\Delta}}\right), \mu_0 H M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta} - J_{eb} \leq 2K_{\Sigma\Delta} \\ \beta = 0, \pi, \mu_0 H M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta} - J_{eb} \geq 2K_{\Sigma\Delta} \end{array} \right\} \quad (1.54)$$

Για  $\beta=0$  προκύπτει,

$$H_{c1} = -\frac{2K_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta} + J_{eb}}{\mu_0 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}} \quad (1.55)$$

και για  $\beta=\pi$  προκύπτει,

$$H_{c2} = -\frac{2K_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta} - J_{eb}}{\mu_0 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}} \quad (1.56)$$



Σχήμα 1.12: Σχηματική απεικόνιση των φυσικών παραμέτρων και των αξόνων εύκολης μαγνήτισης σύμφωνα με το μοντέλο των Meiklejohn και Bean. Το εξωτερικό πεδίο  $H$  σχηματίζει γωνία  $\theta$  με τους άξονες εύκολης μαγνήτισης ( $K_{\Sigma\Delta}$ ,  $K_{A\Sigma}$ ) ενώ η μαγνήτιση  $M_{\Sigma\Delta}$  γωνία  $\beta$ .

Τα χαρακτηριστικά πεδία υστέρησης υπολογίζονται από τις σχέσεις,

$$H_c = \frac{H_{c2} - H_{c1}}{2} = \frac{2K_{\Sigma\Delta}}{\mu_0 M_{\Sigma\Delta}} \quad (1.57)$$

και

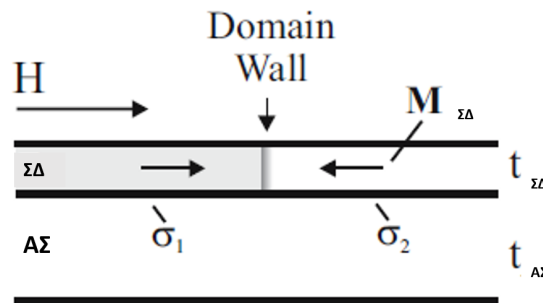
$$H_{eb} = \frac{H_{c1} + H_{c2}}{2} = -\frac{J_{eb}}{\mu_0 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}} \quad (1.58)$$

Το μοντέλο των Meiklejohn και Bean ερμηνεύει τη μετατόπιση του βρόχου υστέρησης, που παρατηρείται στις μαγνητικές ετεροδομές. Παρόλα αυτά, το μοντέλο αποτυγχάνει στους υπολογισμούς του μέτρου του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής. Επίσης, στη σχέση Εξ.1.58, το πεδίο  $H_{eb}$  προκύπτει αντιστρόφως ανάλογο του πάχους  $t_{\Sigma\Delta}$  του δείγματος του σιδηρομαγνητικού υλικού. Πειραματικά διαπιστώνονται πολλές αποκλίσεις από αυτή την συμπεριφορά. Τέλος, το μοντέλο προβλέπει πως το συνεκτικό πεδίο  $H_c$ , δεν μεταβάλλεται λόγω του φαινομένου πόλωσης ανταλλαγής, σε αντίθεση όμως με τα πειραματικά αποτελέσματα, όπου συνήθως παρατηρείται αύξηση του μέτρου του πεδίου αυτού.



### Το μοντέλο του Malozemoff

Ο Malozemoff, πρότεινε ένα καινούριο μηχανισμό σχηματισμού της ανισοτροπίας ανταλλαγής (μονοαξονικής ανισοτροπίας) [34]. Υπέθεσε, πως η επιφανειακή τραχύτητα στη διεπιφάνεια προκαλεί πλευρικές μεταβολές στο πεδίο πόλωσης ανταλλαγής, κάτι που οδηγεί στο σχηματισμό περιοχών (domains) στο στρώμα του σιδηρομαγνητικού υλικού. Η διάταξη απεικονίζεται στο Σχ.1.13. Το σιδηρομαγνητικό υλικό διαχωρίζεται σε δύο περιοχές με ένα μαγνητικό τοίχωμα (domain wall). Η επιφανειακή ενέργεια στις δύο περιοχές δεν είναι ίδια.



Σχήμα 1.13: Σχηματική απεικόνιση διμαγνητικής ετεροδομής, όπου το σιδηρομαγνητικό υλικό διαχωρίζεται σε μαγνητικές περιοχές διαφορετικής επιφανειακής ενέργειας  $\sigma_1, \sigma_2$ , μετά την ανταπόκρισή του σε εξωτερικό πεδίο  $H$  [34]. Το πάχος του σιδηρομαγνητικού στρώματος είναι  $t_{\Sigma\Delta}$  και του αντισιδηρομαγνητικού  $t_{A\Sigma}$ .

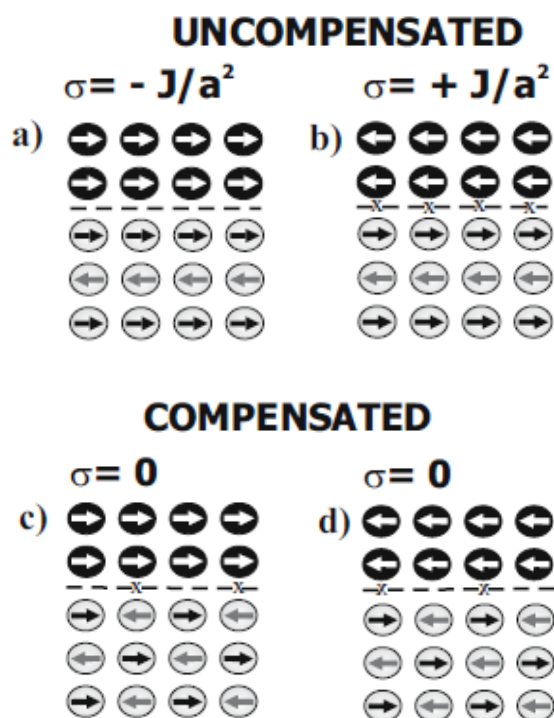
Θεωρώντας την επιφανειακή ενέργεια στην μια περιοχή ίση με  $\sigma_1$  και στην άλλη ίση με  $\sigma_2$ , το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής προκύπτει,

$$H_{eb} = \frac{\Delta\sigma}{2M_{\Sigma\Delta}t_{\Sigma\Delta}} \quad (1.59)$$

όπου,  $M_{\Sigma\Delta}$  η μαγνήτιση και  $t_{\Sigma\Delta}$  το πάχος του σιδηρομαγνητικού υλικού.

Όταν το σύστημα είναι διατεταγμένο σύμφωνα με τις δομές c) και d) του Σχ.1.14 (ισοσταθμισμένη διάταξη, compensated structure), τότε πεδίο πόλωσης ανταλλαγής προκύπτει μηδενικό. Αντίθετα, στην περίπτωση που το σύστημα ακολουθεί τις μη ισοσταθμισμένες διεπιφάνειες a) και b) του Σχ.1.14, η διαφορά της επιφανειακής ενέργειας των δυο περιοχών είναι,

$$\Delta\sigma = \frac{2J}{a^2} \quad (1.60)$$



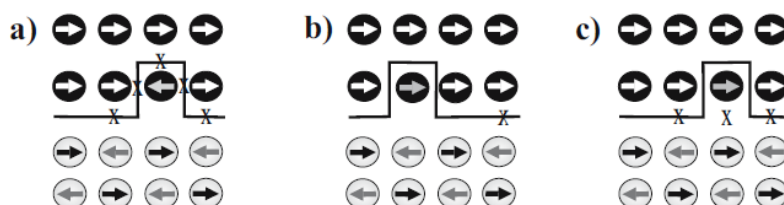
Σχήμα 1.14: Μαγνητική διάταξης μη ισοσταθμισμένων (a, b) και ισοσταθμισμένων (c, d) διεπιφανειών [34]. Με τον όρο  $\sigma$  απεικονίζεται η επιφανειακή ενέργεια ανταλλαγής κάθε συστήματος.

όπου  $J$  είναι η σταθερά ανταλλαγής μεταξύ των spins στη διεπιφάνεια και  $a$  η πλεγματική σταθερά. Αντικαθιστώντας στην Εξ.1.59, το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής προκύπτει,

$$H_{eb} = \frac{J}{a^2 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}} \quad (1.61)$$

Το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής που υπολογίστηκε, προκύπτει αρκετές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από τα πειραματικά αποτελέσματα. Οι διατάξεις, δηλαδή, του Σχ.1.14, δεν περιέχουν το φυσικό περιεχόμενο που απαιτείται για την ερμηνεία του φαινομένου. Για αυτό το λόγο, ο Malozemoff εισήγαγε την επιφανειακή τραχύτητα στους υπολογισμούς του, ως βασικό μηχανισμό σχηματισμού μη ισοσταθμισμένων (uncompensated) spins, που είναι απαραίτητα για τη μετατόπιση του βρόχου υστέρησης (Σχ.1.15).

Η διάταξη που απεικονίζεται στην εικόνα (c) του Σχ.1.15, είναι εκείνη που ελαχιστοποιεί την ενέργεια του συστήματος. Κάθε ανωμαλία (λόγω τραχύτητας) στη διεπιφάνεια συνεισφέρει στην ενεργειακή διαφορά μεταξύ των σιδηρομαγνητικών περιοχών κατά  $2zJ$ , με  $z$  τον αριθμό των διαστάσεων του συστήματος.

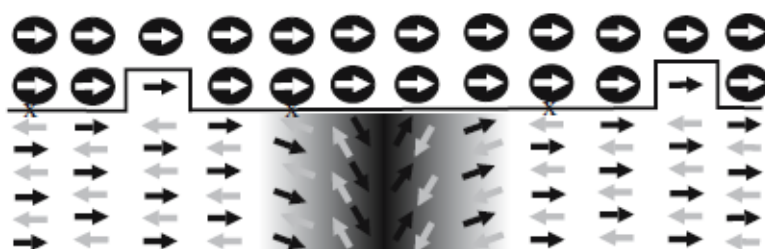


Σχήμα 1.15: Μαγνητικές διατάξεις διεπιφανειών με ενδοεπιφανειακή τραχύτητα. Λόγω της τραχύτητας ένα αντισιδηρομαγνητικό spin παρεισφρύνει στο μονοατομικό στρώμα του σιδηρομαγνητικού υλικού. Η διάταξη c) είναι η διάταξη ελάχιστης ενέργειας [34].

Καθώς η δομή της διεπιφάνειας σε ατομικό επίπεδο είναι τυχαία, λόγω τραχύτητας, θα είναι τυχαία και η επιφανειακή ενέργεια της κάθε περιοχής, δηλαδή,  $\sigma = \pm zJ/a^2$ . Η επιφανειακή ενέργεια ανταλλαγής δίνεται από την σχέση,

$$J_{eb} = \frac{J}{L} \quad (1.62)$$

Το τυχαίο πεδίο πόλωσης ανταλλαγής, που προκύπτει από την ενδοεπιφανειακή τραχύτητα, συντελεί στο σπάσιμο του αντισιδηρομαγνητικού υλικού σε περιοχές διαφορετικής διάταξης (domains). Οι περιοχές διαχωρίζονται από κάθετα στη διεπιφάνεια μαγνητικά τοιχώματα, όπως απεικονίζεται στο Σχ.1.16. Η ενεργειακή δια-



Σχήμα 1.16: Σχηματισμός μαγνητικού τοιχώματος στην αντισιδηρομαγνητική περιοχή διμαγνητικής ετεροδομής λόγω του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής που προκύπτει εξαιτίας της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας [34].

φορά μεταξύ δυο περιοχών είναι,

$$\Delta\sigma = \frac{4zJ}{\pi aL} \quad (1.63)$$

και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής,

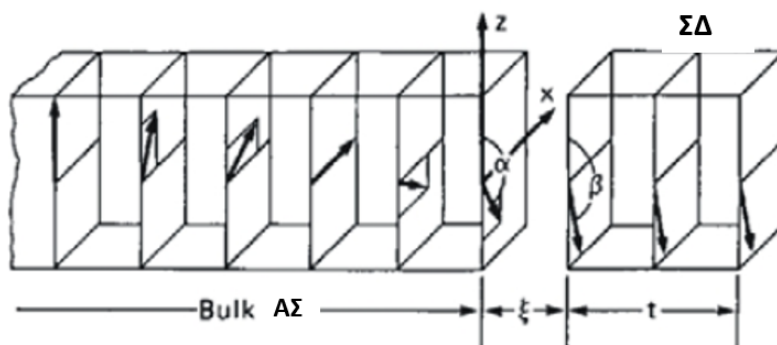
$$H_{eb} = \frac{2z\sqrt{A_{A\Sigma}K_{A\Sigma}}}{\pi^2 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}} \quad (1.64)$$

όπου,  $A_{A\Sigma} = J/a$ . Το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής που υπολογίστηκε, προσεγγίζει με μεγάλη ακρίβεια τα πειραματικά αποτελέσματα.

### Το μοντέλο του Mauri

Ο Mauri, βασιζόμενος στο μοντέλο των Meiklejohn και Bean, υπέθεσε πως το αντισιδηρομαγνητικό υλικό, δεν ανταποκρίνεται στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο [35]. Επίσης, υπέθεσε πως τα αντισιδηρομαγνητικά spins, σχηματίζουν ένα μαγνητικό τοίχωμα παράλληλο στη διεπιφάνεια.

Η διάταξη του συστήματος απεικονίζεται στο Σχ.1.17. Λόγω του εξωτερικού πεδίου, τα spins του σιδηρομαγνητικού στρώματος στρέφονται κατά γωνία  $\beta$ , ως προς τους άξονες εύκολης μαγνήτισης των δυο υλικών (που είναι μεταξύ τους παράλληλοι). Τα spins του πρώτου ατομικού στρώματος, του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, στρέφονται κατά γωνία  $\alpha$ , ενώ τα επόμενα ατομικά στρώματα στρέφονται σε μικρότερες γωνίες. Αυτός είναι ο μηχανισμός σχηματισμού του παράλληλου στη διεπιφάνεια τοιχώματος. Η ολική ενέργεια του συστήματος δίνεται από τη



Σχήμα 1.17: Σχηματισμός μαγνητικού τοιχώματος παράλληλου στη διεπιφάνεια διμαγνητικού συστήματος, σύμφωνα με το μοντέλο του Mauri [35].

σχέση,

$$\epsilon = -\mu_0 H M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta} \cos(\theta - \beta) + K_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta} \sin^2(\beta) - J_{eb} \cos(\beta - \alpha) - 2\sqrt{A_{A\Sigma}K_{A\Sigma}}(1 - \cos(a)) \quad (1.65)$$

όπου,  $M_{\Sigma\Delta}$  είναι η μαγνήτιση του σιδηρομαγνητικού υλικού,  $t_{\Sigma\Delta}$  το πάχος του σιδηρομαγνητικού υλικού,  $K_{\Sigma\Delta}$  η ανισοτροπία του σιδηρομαγνητικού υλικού,  $A_{A\Sigma}$  η παράμετρος ακαμψίας ανταλλαγής του αντισιδηρομαγνητικού υλικού και  $K_{A\Sigma}$  η παράμετρος ανισοτροπίας του αντισιδηρομαγνητικού υλικού.

Ο πρώτος όρος είναι η ενέργεια Zeeman, που προκύπτει από την ανταπόκριση του σιδηρομαγνητικού υλικού στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Ο δεύτερος όρος είναι η ενέργεια ανισοτροπίας του σιδηρομαγνητικού υλικού και ο τρίτος η ενέργεια ανταλλαγής. Ο τελευταίος όρος είναι η ενέργεια του τοιχώματος. Ελαχιστοποιώντας την ενέργεια ως προς τις γωνίες  $\alpha$  και  $\beta$  προκύπτουν οι εξισώσεις,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{H}{H_{eb}^{\infty}} \sin(\theta - \beta) + \sin(\beta - \alpha) = 0 \\ P \sin(\alpha) - \sin(\beta - \alpha) = 0 \end{array} \right\} \quad (1.66)$$

με  $P = \frac{2\sqrt{A_{A\Sigma}K_{A\Sigma}}}{J_{eb}}$  και  $H_{eb}^{\infty} = -\frac{J_{eb}}{\mu_0 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}}$ . Η επίλυση του συστήματος των δυο εξισώσεων πραγματοποιείται για την περίπτωση όπου  $\theta = 0$  και  $K_{\Sigma\Delta} = 0$ . Αρχικά υπολογίζεται από τη δεύτερη εξίσωση η γωνία  $\alpha$ ,

$$\alpha = \pm \arccos\left(\pm \frac{P - \cos(\beta)}{\sqrt{1 + P^2 - 2P \cos(\beta)}}\right) \quad (1.67)$$

Το τελευταίο αποτέλεσμα εισάγεται στις Εξ.1.66 και χρησιμοποιώντας τη συνθήκη  $H = H_c$  όταν  $\beta = -\pi/2$  προκύπτουν τα πεδία  $H = H_{c1}$  και  $H = H_{c2}$ .

Προκύπτει από τις γνωστές σχέσεις ότι,

$$H_c = \frac{H_{c2} - H_{c1}}{2} = 0 \quad (1.68)$$

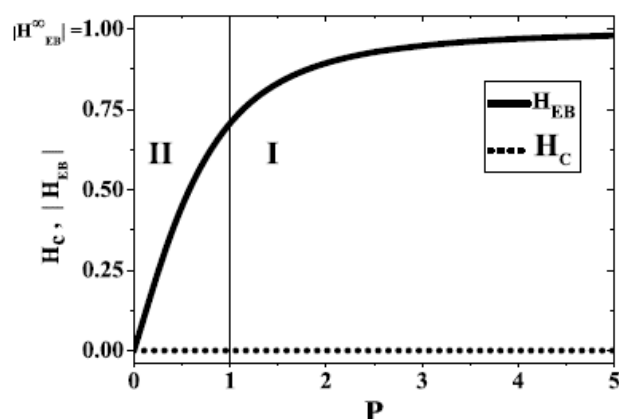
και

$$H_{eb} = \frac{H_{c1} + H_{c2}}{2} = -\frac{J_{eb}}{\mu_0 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}} \frac{P}{\sqrt{1 + P^2}} \quad (1.69)$$

Στο Σχ.1.18 απεικονίζεται η γραφική παράσταση της Εξ.1.69. Από το σχήμα φαίνεται πως για  $P \gg 1$

$$H_{eb} = H_{eb}^{\infty} = -\frac{J_{eb}}{\mu_0 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}} \quad (1.70)$$

Για μικρές τιμές της παραμέτρου  $P$  το πεδίο ελαττώνεται ενώ όταν  $P=0$  μηδενίζεται. Χρησιμοποιώντας το θεώρημα Taylor στην περίπτωση που  $P \ll 1$  (weak



Σχήμα 1.18: Το διάγραμμα του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής  $H_{EB}$  και του συνεκτικού πεδίου  $H_c$  συναρτήσει της παραμέτρου  $P$  [35].

coupling) προκύπτει,

$$H_{eb} = \frac{-2\sqrt{A_{AS}K_{AS}}}{\mu_0 M_{\Sigma\Delta} t_{\Sigma\Delta}} \quad (1.71)$$

Στην ακραία αυτή περίπτωση, δηλαδή, το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής είναι ανεξάρτητο από την ενέργεια ανταλλαγής.

## 1.6 Μαγνητικές διαμορφώσεις σολιτονικού χαρακτήρα

Στην παράγραφο αυτή, θα αναφερθούμε σε διαμορφώσεις της μαγνήτισης (magnetic textures) που έχουν από τη φύση τους περιορισμένη έκταση μέσα στο σιδηρομαγνητικό υλικό και ως εκ τούτου χαρακτηρίζονται ως σολιτονικές μιας και προκύπτουν ως λύσεις της μη-γραμμικής διαφορικής εξίσωσης κίνησης της μαγνήτισης του υλικού (Εξίσωση Landau-Lifshitz-Gilbert). Γίνεται αναφορά (α) στα μαγνητικά τοιχώματα που σχηματίζονται στο όριο μεταξύ δύο μαγνητικά κορεσμένων περιοχών με αντίθετες φορές μαγνήτισης και (β) στα μαγνητικά σκυρμιόνια που είναι στροβιλοειδείς διαμορφώσεις της μαγνήτισης που εμφανίζονται είτε στον όγκο ορισμένων υλικών (πχ MnSi) είτε στις ενδοεπιφάνειες σιδηρομαγνητικών μετάλλων με βαρέα μέταλλα (πχ Fe/Ir). Τέτοιες μαγνητικές διαμορφώσεις σολιτονικού χαρακτήρα χρησιμοποιούνται ή δύναται να χρησιμοποιηθούν ως φορείς ψηφιακής πληροφορίας σε σπιντρονικές διατάξεις.

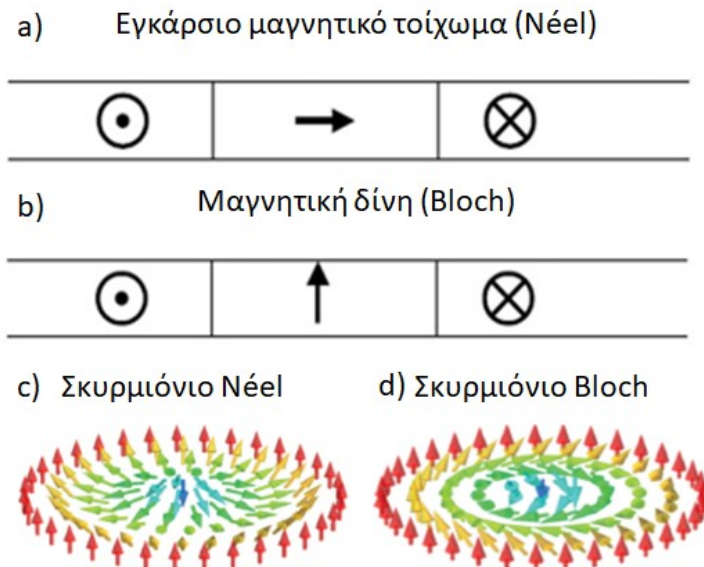
### Μαγνητικά τοιχώματα

Υπάρχουν δύο τύποι μαγνητικών τοιχωμάτων και η διάκριση μεταξύ τους επιτυγχάνεται μέσω του στροβιλισμού της μαγνήτισης που ορίζεται ως

$$m_v(z) = \sum_{i \in \Sigma\Delta} [\hat{r}_i \times \hat{m}_i]_z \delta(z_i - z) / \sum_{i \in \Sigma\Delta} \delta(z_i - z) \quad (1.72)$$

όπου,  $\hat{r}_i$  είναι η προβολή του διανύσματος θέσης του κόκκου  $i$  στο επίπεδο  $x - y$  [36] και καταγράφει το βαθμό της περιστροφής της.

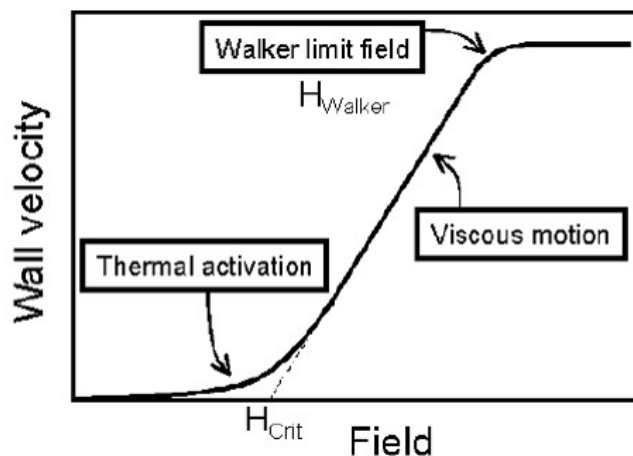
Η πιο απλή δομή είναι το εγκάρσιο μαγνητικό τοίχωμα (Néel). Η φορά της αντιστροφής της μαγνήτισης στα τοιχώματα αυτά πραγματοποιείται κάθετα στο επίπεδο των ατομικών θέσεων (Σχ.1.19α). Επομένως ο στροβιλισμός ( $m_v$ ) του συστήματος αυτού είναι μηδενικός. Αντίθετα, στα μαγνητικά τοιχώματα τύπου δίνης (Bloch) η φορά της αντιστροφής της μαγνήτισης είναι μέσα στο επίπεδο του τοιχώματος (Σχ.1.19b). Τα τοιχώματα αυτά χαρακτηρίζονται από στροβιλισμό  $m_v = 1$ .



Σχήμα 1.19: Μαγνητικές διαμορφώσεις σολιτονικού χαρακτήρα: (a) Εγκάρσια μαγνητικά τοιχώματα, (b) Μαγνητικές δίνες, (c) Μαγνητικό Σκυρμίνιο τύπου Néel, (d) Μαγνητικό Σκυρμίνιο τύπου Bloch [10].

Η κίνηση των μαγνητικών τοιχωμάτων σε μονοδιάστατα συστήματα περιγράφεται από την ταχύτητα και την ευκινησία διάδοσης. Χαρακτηριστική είναι η καμπύλη του σχήματος Σχ.1.20 που απεικονίζει την ευκινησία διάδοσης, δηλαδή την

κλίση της καμπύλης της ταχύτητας διάδοσης συναρτήσει του εξωτερικού πεδίου.



Σχήμα 1.20: Υπολογισμός της εξάρτησης της ταχύτητας διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων από το εξωτερικό πεδίο, μέσω των εξισώσεων LLG σε σιδηρομαγνητικά νανοσύρματα. Παρατηρούνται τρεις περιοχές που αναδεικνύουν τρεις διαφορετικούς φυσικούς μηχανισμούς που διέπουν τη δυναμική της μαγνήτισης.

Παρατηρούνται τρεις περιοχές με διαφορετική κλίση, δηλαδή διαφορετική ευκίνησια διάδοσης, που υποδηλώνουν διαφορετική εξάρτηση της δυναμικής των μαγνητικών τοιχωμάτων από το εξωτερικό πεδίο. Η πρώτη περιοχή που παρατηρείται σε μικρά πεδία, χαρακτηρίζεται από μικρές ταχύτητες και εκθετική αύξηση της ταχύτητας με το πεδίο. Η ενέργεια του εξωτερικού πεδίου είναι μικρή και η δυναμική καθορίζεται κυρίως από θερμική διέγερση των μαγνητικών τοιχωμάτων. Στη δεύτερη περιοχή (ενδιάμεσες τιμές πεδίου) παρατηρείται γραμμική εξάρτηση της ταχύτητας από το εξωτερικό πεδίο. Η δυναμική της μαγνήτισης καθορίζεται από τον ρυθμό ελάττωσης της ενέργειας της περιστροφικής κίνησης των μαγνητικών ροπών από το φαινόμενο της μετάπτωσης ( $u \sim 1 \gamma / \alpha$ , όπου  $\gamma$  ο γυρομαγνητικός λόγος και  $\alpha$  η σταθερά μετάπτωσης). Στην τελευταία περιοχή, που ξεκινάει από το κρίσιμο πεδίο  $H_{Walker}$  (όριο Walker), παρατηρείται ελάττωση της κλίσης και κορεσμός της ταχύτητας. Σε αυτές τις τιμές του εξωτερικού πεδίου είναι έντονος ο ρυθμός ελάττωσης της ενέργειας της περιστροφικής κίνησης των μαγνητικών ροπών λόγω του πεδίου, γεγονός που οδηγεί σε πολύ υψηλή μετάπτωση και δικαιολογεί τον κορεσμό της ταχύτητας.

Η κίνηση των μαγνητικών τοιχωμάτων σε μονοδιάστατα συστήματα (νανοσύρματα, νανοσωλήνες, νανολωρίδες), επιτυγχάνεται με διάφορους τρόπους, όπως μέσω εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, spin - πολωμένου ρεύματος, τοπικών βαθ-



μίδων (διακυμάνσεων) της θερμοκρασίας κ.α. Για την υλοποίηση των διατάξεων μονοδρομικής μνήμης που πρότεινε ο Parkin [21], είναι απαραίτητος ο έλεγχος της διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων. Ο έλεγχος αυτός μπορεί να επιτευχθεί με το σχεδιασμό, κατά τη διαδικασία της σύνθεσης των υλικών, κέντρων καρφώματος που επιτρέπουν την επιβράδυνση ή και την ακινητοποίηση των μαγνητικών τοιχωμάτων. Τέτοια κέντρα καρφώματος κατασκευάζονται με περιοδική χημική ή και γεωμετρική διαμόρφωση των μονοδιάστατων σιδηρομαγνητικών μέσων στα οποία διαδίδονται και παίζουν το ρόλο του ενεργειακού φραγμού που εμποδίζει τη διάδοση των τοιχωμάτων.

### Μαγνητικά σκυρμιόνια

Το μαγνητικό σκυρμιόνιο είναι μια χωρικά περιορισμένη διδιάστατη διαμόρφωση της μαγνήτισης που προκύπτει από σταδιακή τοπική περιστροφή των μαγνητικών ροπών σε μαγνητικά υλικά [10, 23, 37]. Όπως φαίνεται και στα σχήματα Σχ.1.19c,d, καθώς μετατοπιζόμαστε από τα άκρα του σκυρμιονίου προς το κέντρο του, οι μαγνητικές ροπές προσανατολίζονται σταδιακά από την "πάνω" κατάσταση στην "κάτω" (ή και το αντίστροφο). Υπάρχουν δυο διαφορετικοί τύποι σκυρμιονίων, τα Bloch και τα Néel, που αντιστοιχούν σε διαφορετικές διευθύνσεις αντιστροφής μεταξύ των δυο αυτών καταστάσεων.

Τα μαγνητικά σκυρμιόνια χαρακτηρίζονται από τον τοπολογικό αριθμό,

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int d^2r S \cdot (\partial_x S \times \partial_y S). \quad (1.73)$$

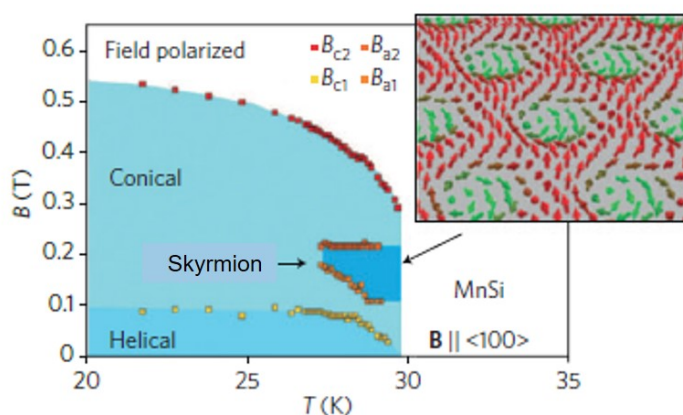
Η ποσότητα αυτή αναφέρεται στην προβολή των κατευθύνσεων των μαγνητικών ροπών σε μοναδιαία σφαίρα. Στα μαγνητικά σκυρμιόνια ισχύει ότι  $Q = 1$  [10, 38], δηλαδή η επιφάνεια της σφαίρας καλύπτεται επακριβώς μια φορά. Σε αυτή τους την ιδιότητα τα σκυρμιόνια οφείλουν όλα τα τοπολογικά τους χαρακτηριστικά.

Η προέλευση των μαγνητικών σκυρμιονίων ποικίλει και καθορίζεται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού. Μια βασική αιτία σχηματισμού σκυρμιονίων είναι οι διπολικές αλληλεπιδράσεις μαγνητοστατικής φύσεως. Σε μαγνητικά υμένα ή νανολωρίδες με κάθετη στην επιφάνεια ανισοτροπία, οι διπολικές αλληλεπιδράσεις ευνοούν τον εντός του επιπέδου προσανατολισμό των μαγνητικών ροπών, ενώ αντίθετα, η ανισοτροπία ευνοεί τον κάθετο στο επίπεδο προσανατολισμό. Ο ανταγωνισμός μεταξύ αυτών των αλληλεπιδράσεων οδηγεί σε μια κατηγορία σκυρμιονίων, που ονομάζονται μαγνητικές φυσαλίδες [10, 23].

Μία άλλη πολύ συνηθισμένη φυσική αιτία που οδηγεί στο σχηματισμό των σκυρμιονίων είναι η σχετικιστικής προέλευσης αλληλεπιδράσεις Dzialoshinskii-Moriya (DM) [8, 9]. Αξίζει να σημειωθεί, πώς ο προσανατολισμός του διανύσματος  $\vec{d}$  που υποδηλώνει τη διεύθυνση των αλληλεπιδράσεων αυτών, καθορίζει και τον τύπο του σκυρμιονίου, δηλαδή όταν είναι παράλληλο στο δεσμό δυο γειτονικών ροπών οδηγεί σε σχηματισμό Bloch σκυρμιονίων, ενώ όταν είναι κάθετο σε σχηματισμό Néel σκυρμιονίων.

Ιδιαίτερο τεχνολογικό ενδιαφέρον παρουσιάζει το μέγεθος των σκυρμιονίων [23, 24], καθώς αποτελεί καθοριστικό παράγοντα τόσο για την ευστάθεια και την ευκινησία τους όσο και για την χωρητικότητα των διατάξεων μαγνητικής αποθήκευσης. Οι μαγνητικές φυσαλίδες παρουσιάζουν τυπικά μεγέθη 100 nm - 1 μm, ενώ τα σκυρμιόνια που προκύπτουν από αλληλεπιδράσεις DM (5 - 100) nm. Το ιδιαίτερα μικρό μέγεθος των τελευταίων είναι και ο κύριος λόγος, που συγκεντρώνουν το ερευνητικό ενδιαφέρον αφού οδηγεί σε μεγάλη χωρητικότητα μαγνητικής αποθήκευσης αλλά και σε μεγάλη ευκινησία διάδοσης. Τα σκυρμιόνια, που προκύπτουν από τους άλλους δυο μηχανισμούς, είναι της τάξης της ατομικής σταθεράς.

Η σταθεροποίηση των σκυρμιονίων σε ελικομαγνήτες (υλικά B20) πραγματοποιείται σε ένα μικρό τμήμα του διαγράμματος φάσης Σχ.1.21 [10, 23]. Επίσης, πειραματικά ο σχηματισμός των σκυρμιονίων παρατηρείται σε χαμηλές θερμοκρασίες, γεγονός που καθιστά δύσκολη την τεχνολογική τους αξιοποίηση.



Σχήμα 1.21: Διάγραμμα φάσης υμενίων MnSi συναρτήσει του εξωτερικού πεδίου B και της θερμοκρασίας T. Η σκυρμιονική φάση καταλαμβάνει ένα μικρό τμήμα του διαγράμματος φάσης σε χαμηλές θερμοκρασίες ( $T < 30$  K) [23].

Η μετακίνηση των μαγνητικών σκυρμιονίων δεν μπορεί να πραγματοποιηθεί

λόγω της δομής τους μέσω εξωτερικού μαγνητικού πεδίου (μαγνητικές ροπές αντίθετης φοράς δέχονται αντίθετες δυνάμεις). Συνήθως, η μετακίνησή τους πραγματοποιείται μέσω της εφαρμογής ασθενούς spin-πολωμένου ρεύματος [23, 39, 40]. Το φαινόμενο βασίζεται στη μεταφορά στροφορμής από τα ηλεκτρόνια στις τοπικές μαγνητικές ροπές. Η κίνηση του σκυρμιονίου προκαλεί τοπική μεταβολή του μαγνητικού πεδίου και επομένως ηλεκτρομαγνητική επαγωγή, που οδηγεί στην εφαρμογή μια δύναμης στρέψης (δύναμη Magnus) πάνω στο σκυρμιόνιο κατά την κίνησή του. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται σκυρμιονικό φαινόμενο Hall και προκαλεί εκτροπή του σκυρμιονίου προς τα πλευρικά όρια των υμενίων ή των νανολωρίδων με τελικό αποτέλεσμα την καταστροφή του [41, 42]. Η πλευρική εξαϋλωση των σκυρμιονίων αποτελεί πεδίο έρευνας, προκειμένου να προχωρήσει η εξέλιξη των σκυρμιονικών διατάξεων.

## 1.7 Σχεδόν μονοδιάστατες μαγνητικές νανοδομές

Οι επιμήκεις μαγνητικές νανοδομές, όπως τα νανοσύρματα, χαρακτηρίζονται από ενισχυμένη ανισοτροπία εξαιτίας του σχήματός τους και αποτελούν υποσχόμενες δομές για σημαντικές καινοτομίες σε ποικίλες περιοχές της σύγχρονης τεχνολογίας όπως η μαγνητική αποθήκευση [16], η σπιντρονική [16] και η βιοϊατρική [43, 44]. Ο έλεγχος του σχήματος των δομών αυτών δίνει τη δυνατότητα ελέγχου των μαγνητικών τους ιδιοτήτων, δηλαδή των χαρακτηριστικών υστέρησης αλλά και του μηχανισμού αντιστροφής της μαγνήτισης. Πιο συγκεκριμένα, στα κυλινδρικά νανοσύρματα η διάμετρος της βάσης του κυλίνδρου είναι μικρότερη από το εύρος των μαγνητικών τοιχωμάτων, με αποτέλεσμα, το σύστημα σε αυτές τις διευθύνσεις να μην σχηματίζει μαγνητικές περιοχές. Αντίθετα, το ύψος του κυλίνδρου ( $L$ ) μπορεί να είναι αρκετά μεγαλύτερο από τη διάμετρο ( $L \gg D$ ). Ως εκ τούτου, το σύστημα σχηματίζει μαγνητικές περιοχές κατά μήκος του άξονα του κυλίνδρου. Δεν μπορούμε, δηλαδή, να υποθέσουμε σύμφωνη στροφή των spins, κατά την ανταπόκριση του συστήματος σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Το καθιερωμένο μοντέλο των Stoner και Wolfarth [33, 45] που περιγράφει με ακρίβεια τη δυναμική της μαγνήτισης σε απομονωμένα νανοσωματίδια [46] δεν μπορεί να περιγράψει ικανοποιητικά τον μηχανισμό αντιστροφής της μαγνήτισης στα νανοσύρματα. Στα σιδηρομαγνητικά νανοσύρματα η αντιστροφή της μαγνήτισης πραγματοποιείται μέσω μιας πιο πολύπλοκης διαδικασίας που περιλαμβάνει τρία στάδια, την πυρήνωση, δηλαδή το σχηματισμό μαγνητικών τοιχωμάτων στα ελεύθερα άκρα του

νανοσύρματος, την διάδοσή τους προς το κέντρο του σύρματος όπου συγχωνεύονται και επιτυγχάνεται η πλήρης αντιστροφή της μαγνήτισης [16, 47, 48]. Το φαινόμενο γίνεται ακόμα πιο πολύπλοκο καθώς, έχει αποδειχθεί [49, 50] πως η διάμετρος του σιδηρομαγνητικού νανοσύρματος ελέγχει το χαρακτήρα των μαγνητικών τοιχωμάτων και οδηγεί σε μια μετάβαση από εγκάρσια μαγνητικά τοιχώματα σε τοιχώματα τύπου δίνης, καθώς η διάμετρος προσεγγίζει το μήκος ανταλλαγής. Κεντρικό σκοπό της βασικής έρευνας σχετικής με τις μαγνητικές νανοδομές αποτελεί, λοιπόν, η αποκάλυψη των παραγόντων που διαμορφώνουν το μηχανισμό αντιστροφής της μαγνήτισης.

Πέρα όμως από τον σχεδόν μονοδιάστατο χαρακτήρα των μαγνητικών νανοσύρματων και νανοσωλήνων, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει και ο ρόλος της καμπυλότητας της επιφάνειάς τους. Έχει προταθεί πως η καμπύλωση της επιφάνειας [51] αποτελεί παράγοντα ανάπτυξης αλληλεπιδράσεων Dzialoshinskii-Moriya [8, 9] και δημιουργίας σκυρμιονίων [10, 23]. Ακόμα, η έλλειψη των πλευρικών ορίων σε μια κυλινδρική δομή προτείνεται ως παράγοντας αποφυγής του σκυρμιονικού φαινομένου Hall [41, 42], δηλαδή της παρέκκλισης και της καταστροφής των σκυρμιονίων στα πλευρικά όρια των νανολωρίδων αλλά και του ανεξέλεγκτου σχηματισμού τους στα άκρα των νανολωρίδων και των λεπτών υμενίων (edge effect) [52].

Μία νέα προοπτική στις διατάξεις μαγνητικής αποθήκευσης έχει αναδυθεί [21, 53], βασισμένη στη δυνατότητα ελεγχόμενου σχηματισμού και διάδοσης μαγνητικών διαμορφώσεων σολιτονικού χαρακτήρα σε μαγνητικά νανοσύρματα και νανοσωλήνες, λόγω τόσο του σχεδόν μονοδιάστατου χαρακτήρα τους αλλά και της καμπυλωμένης επιφάνειάς τους.

## 1.8 Σκοπός της διατριβής

Σκοπός της παρούσας διατριβής είναι η μελέτη του σχηματισμού και της διάδοσης μαγνητικών διαμορφώσεων τοπολογικού χαρακτήρα και συγκεκριμένα μαγνητικών τοιχωμάτων και σκυρμιονίων σε σύνθετα σχεδόν - μονοδιάστατα νανοδομικά μαγνητικά υλικά. Στο κεφάλαιο 2, γίνεται παρουσίαση των φυσικών μοντέλων κλασικών spins αλλά και των θεωρητικών / υπολογιστικών μεθόδων που αξιοποιούνται για τη μελέτη των συστημάτων αυτών.

Η διατριβή επικεντρώνεται σε τρεις κατηγορίες μαγνητικών υλικών. Στο κεφάλαιο 3, μελετώνται διμαγνητικά νανοσύρματα μορφολογίας σιδηρομαγνητικού πυ-

ρήνα / αντισιδηρομαγνητικού φλοιού (πχ Co/CoO). Σκοπός της μελέτης είναι η ανάδειξη της επίδρασης του φαινομένου πόλωσης - ανταλλαγής στα χαρακτηριστικά υστέρησης και στο μηχανισμό αντιστροφής της μαγνήτισης των υλικών αυτών. Εστιάζουμε στην εξάρτηση του φαινομένου από δομικά χαρακτηριστικά, όπως η ενδοεπιφανειακή τραχύτητα και η πολυκρυσταλλικότητα του φλοιού.

Στο κεφάλαιο 4, πραγματοποιείται μελέτη σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων που παρουσιάζουν χωρική διαμόρφωση της διαμέτρου τους. Τα συστήματα αυτά, σε αντιστοιχία με την προηγούμενη περίπτωση νανοσυρμάτων, αποτελούνται από δυο διακριτά μαγνητικά μέρη διαφορετικής ανισοτροπίας. Στην πρώτη περίπτωση η διαφορετική ανισοτροπία επιτυγχάνεται μέσω της φυσικής οξειδωσης του σιδηρομαγνητικού υλικού, καθώς το οξείδιο του σιδηρομαγνητικού μετάλλου παρουσιάζει υψηλή ανισοτροπία, ενώ στη δεύτερη κατηγορία νανοσυρμάτων η διαφοροποίηση της ανισοτροπίας των δυο μερών της ετεροδομής επιτυγχάνεται μέσω της διαφοροποίησης των γεωμετρικών τους χαρακτηριστικών.

Στο κεφάλαιο 5, μελετάται ο σχηματισμός μαγνητικών σκυρμιονίων σε καμπυλόγραμμες νανοδομές, όπως οι νανοσωλήνες. Οι διατάξεις αυτές, λόγω της γεωμετρίας τους, ενδέχεται να οδηγούν σε αποφυγή του σκυρμιονικού φαινομένου Hall αλλά και του ανεξέλεγκτου σχηματισμού σκυρμιονίων, που παρατηρείται στα πλευρικά όρια άλλων μαγνητικών συστημάτων όπως οι νανολωρίδες. Σκοπός της συγκεκριμένης μελέτης είναι η ανάδειξη των γεωμετρικών παραμέτρων που καθιστούν δυνατό το σχηματισμό των σκυρμιονίων σε αυτές τις δομές.

Τέλος, στο κεφάλαιο 6 συνοψίζονται τα κεντρικά συμπεράσματα της διατριβής και διατυπώνονται οι προοπτικές περαιτέρω μελέτης.



## Κεφάλαιο 2

# Θεωρητικό και υπολογιστικό υπόβαθρο

Οι εκφράσεις των βασικών αλληλεπιδράσεων που περιεγράφηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο, διαμορφώνουν τη μαγνητική τάξη σε ατομικό επίπεδο. Η αριθμητική προσομοίωση ενός μαγνητικού συστήματος μπορεί να πραγματοποιηθεί λαμβάνοντας υπόψη την ατομιστική περιγραφή των βασικών αυτών αλληλεπιδράσεων. Με αυτό τον τρόπο, όμως, μπορούν να μελετηθούν, λόγω ανεπαρκούς υπολογιστικής ισχύος, συστήματα μικρού μεγέθους (της τάξεως των nm). Ως εκ τούτου, δεν μπορεί να πραγματοποιηθεί προσομοίωση μεγαλύτερων συστημάτων (της τάξεως των  $\mu\text{m}$ ) αντίστοιχων με αυτά που μελετώνται πειραματικά. Για τον λόγο αυτό αναπτύχθηκε η μικρομαγνητική θεωρία.

### 2.1 Μικρομαγνητική περιγραφή μαγνητικής τάξης

Κατά τη μικρομαγνητική περιγραφή, το μαγνητικό σύστημα προσεγγίζεται ως συνεχές μέσο. Η μαγνήτιση στο συνεχές όριο δίνεται από την έκφραση  $\vec{m}(\vec{r}) = \vec{M}(\vec{r})/M_s$ . Το διάνυσμα  $\vec{m}(\vec{r})$  είναι σταθερού μέτρου (μοναδιαίο) και το μόνο που αλλάζει στο χώρο είναι η διεύθυνσή του.

Η μικρομαγνητική ενέργεια των βασικών αλληλεπιδράσεων δίνεται από την

έκφραση [54],

$$E(\vec{m}) = \int dV \{ A |\nabla \vec{m}|^2 + d [(\vec{m} \nabla) \vec{m}_x - \vec{m}_x (\nabla \vec{m})] - \frac{1}{2} \mu_0 \vec{M} \cdot H_{demag} - K_u (\vec{m})^2 - M_s \vec{m} \cdot \vec{B} \} \quad (2.1)$$

όπου  $A, d, K_u$  οι μικρομαγνητικές παράμετροι ανταλλαγής, DM, διπολικών αλληλεπιδράσεων και ανισοτροπίας αντίστοιχα και  $H_{demag} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int dr M_s (3 \frac{(\vec{m} \cdot \vec{r}) \vec{r}}{|\vec{r}|^5} - \frac{\vec{m}}{|\vec{r}|^3})$ . Οι μικρομαγνητικές παράμετροι του υλικού που υπεισέρχονται στην Εξ.2.1 μπορούν να εξαχθούν είτε από ab-initio υπολογισμούς της ηλεκτρονικής δομής του υλικού είτε έμμεσα από πειραματικές μετρήσεις.

Η βασική κατάσταση του συστήματος προκύπτει από την ελαχιστοποίηση αυτού του συναρτησοειδούς (Εξ.2.1). Στην παρούσα διατριβή πραγματοποιείται ελαχιστοποίηση της Εξ.2.1 με αριθμητικές μεθόδους. Για το σκοπό αυτό η Εξ.2.1 διακριτοποιείται όπως περιγράφεται στο Παράρτημα / Α'.1.

Η διακριτοποιημένη μορφή της ενέργειας δίνεται από τη σχέση,

$$E = \sum_i E_i \quad (2.2)$$

όπου η μονοατομική ενέργεια είναι,

$$E_i = -\frac{1}{2} \hat{m}_i \cdot \sum_{\langle j \rangle} J_{ij} \hat{m}_j - \frac{1}{2} D \sum_{\langle j \rangle} \hat{m}_j \times \hat{D}_{ij} - \frac{1}{2} g \hat{m}_i \cdot \sum_j W_{ij} \cdot \hat{m}_j - K_i (\hat{m}_i \cdot \hat{e}_i)^2 - H (\hat{m}_i \cdot \hat{H}) \quad (2.3)$$

Στην Εξ. (2.3) τα καπελάκια υποδεικνύουν μοναδιαία διανύσματα σε καρτεσιανές συντεταγμένες.

Ακόμα, από τη διακριτοποίηση της μικρομαγνητικής ενέργειας προκύπτουν και οι εκφράσεις υπολογισμού των ενεργειακών παραμέτρων του πλέγματος διακριτοποίησης από τις μικρομαγνητικές παραμέτρους του συνεχούς μέσου,

$$J_{cel} = \frac{2AV_{cel}}{\alpha^2} = 2A\alpha \quad (2.4)$$

$$D_{cel} = d \cdot \alpha^2 \quad (2.5)$$

$$g_{cel} = \frac{\mu_0 \mu_{cel}^2}{4\pi \alpha^3}. \quad (2.6)$$



$$K_{cel} = K_u \cdot V_{cel} = K_u \cdot \alpha^3 \quad (2.7)$$

Η ελαχιστοποίηση της (ελεύθερης) ενέργειας του διακριτού συστήματος πραγματοποιείται με τη μέθοδο προσομοίωσης Monte Carlo και τον αλγόριθμο Metropolis.

### 2.1.1 Υπολογιστική μοντελοποίηση αλληλεπιδράσεων

Ο υπολογισμός των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής περιορίζεται μεταξύ πρώτων γειτόνων τόσο στα σιδηρομαγνητικά όσο και στα αντισιδηρομαγνητικά υλικά [55, 56, 57, 58, 59]. Για τη διάταξη του αντισιδηρομαγνητικού υλικού εφαρμόζεται η προσέγγιση του Néel, δηλαδή, το πλέγμα χωρίζεται σε δύο διαφορετικά υποπλέγματα αντίθετης φοράς ροπών ("πάνω" και κάτω") με τέτοιο τρόπο ώστε, γειτονικές ροπές να ανήκουν κάθε φορά σε διαφορετικό υπόπλεγμα. Με αυτό τον τρόπο, κάθε ροπή που είναι πχ στραμμένη προς τα πάνω περιβάλλεται από τέσσερις ροπές που είναι στραμμένες προς τα κάτω. Η σταθερά ανταλλαγής θεωρείται σταθερή για συγκεκριμένου τύπου υλικό και δεν εξαρτάται από την θέση, δηλαδή τα υλικά θεωρούνται ομοιογενή.

Οι αλληλεπιδράσεις DM, ως αλληλεπιδράσεις μικρής εμβέλειας (αντισυμμετρικές αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής), υπολογίζονται μεταξύ πρώτων γειτόνων [60, 61, 62, 63]. Το διάνυσμα  $\vec{D}$  προσανατολίζεται κάθετα στο δεσμό μεταξύ δυο γειτονικών μαγνητικών ροπών, ενώ η διεύθυνση του είναι παράλληλη στο επίπεδο που σχηματίζουν οι ροπές. Το μέτρο του διανύσματος  $\vec{D}$  υποδηλώνει την ισχύ των αλληλεπιδράσεων και διατηρείται σταθερό. Με αυτό τον τρόπο προσομοιώνεται ο σχηματισμός Néel σκυρμιονίων που εμφανίζονται στις ετεροδομές σιδηρομαγνήτη / βαρέος μετάλλου.

Ιδιαίτερη υπολογιστική δυσκολία εμφανίζει η περιγραφή των διπολικών αλληλεπιδράσεων, εξαιτίας της μακράς εμβέλειας που τις χαρακτηρίζει. Για το λόγο αυτό τις χειριζόμαστε όπως περιγράφεται στη συνέχεια. Η διπολική ενέργεια ενός συστήματος N-κόκκων υπολογίζεται από το άθροισμα,

$$E = \sum_{N(i)} E_i \quad (2.8)$$

όπου η μονοατομική ενέργεια δίνεται από την σχέση,

$$E_i = -\frac{1}{2} g \hat{m}_i \cdot \sum_j W_{ij} \cdot \hat{m}_j. \quad (2.9)$$

Ο διπολικός πίνακας  $W_{ij}$  προσδιορίζεται ως εξής [55, 56, 57, 58, 59],

$$W_{ij}^{\alpha\beta} = (3r_{ij}^{\alpha}r_{ij}^{\beta} - \delta_{\alpha\beta})/(R_{ij}/a)^3 \quad (2.10)$$

με  $R_{ij}$  την απόσταση μεταξύ των θέσεων  $i, j$  και  $\hat{r}_{ij}$  το μοναδιαίο διάνυσμα κατά μήκος της διεύθυνσης από την θέση  $i$  στην θέση  $j$ . Οι δείκτες  $\alpha, \beta$  καθορίζουν Καρτεσιανές συντεταγμένες. Οι διπολικές αλληλεπιδράσεις είναι μακριάς εμβέλειας. Το άθροισμα, δηλαδή, των όρων της Εξ. 2.8 από το οποίο υπολογίζεται η διπολική ενέργεια του συστήματος, περιλαμβάνει όλους εκείνους τους όρους, που προκύπτουν από την αλληλεπίδραση ενός  $i$  κεντρικού κόκκου, με όλους τους υπόλοιπους  $j$  κόκκους του συστήματος. Ο ακριβής υπολογισμός των διπολικών αλληλεπιδράσεων, συγκεκριμένα το άθροισμα του τρίτου όρου της Εξ. 2.3, είναι ένα υπολογιστικά απαιτητικό πρόβλημα εξαιτίας του πλήθους των ατόμων του συστήματος. Για να αντιμετωπίσουμε αυτό το πρόβλημα, αναλύουμε το διπολικό πεδίο σε ένα "κοντινό-πεδίο" και σε ένα "μακρινό-πεδίο" και εφαρμόζουμε για το τελευταίο την προσέγγιση μέσου πεδίου [64]. Συγκεκριμένα, γράφουμε

$$\sum_j W_{ij} \cdot \hat{m}_j = \sum_{j, r_{ij} \leq r_0} W_{ij} \cdot \hat{m}_j + \sum_{j, r_{ij} > r_0} W_{ij} \cdot \hat{m}_j \quad (2.11)$$

όπου,  $r_0$  είναι η απόσταση στην οποία περιορίζεται η εμβέλεια της συνιστώσας του κοντινού-πεδίου. Προσεγγίζουμε τον δεύτερο όρο του δεξιού μέλους της παραπάνω έκφρασης ως

$$\sum_{j, r_{ij} > r_0} W_{ij} \cdot \hat{m}_j \approx w_i \cdot \langle \hat{m} \rangle \quad (2.12)$$

όπου

$$w_i = \sum_{\substack{j \in \\ r_{ij} > r_0}} W_{ij} \quad (2.13)$$

είναι ο απομαγνητίζων πίνακας της θέσης  $i$  και  $\langle \hat{m} \rangle$  είναι η μέση μαγνητική ροπή του συστήματος. Αξίζει να σημειωθεί πως η προσέγγιση μέσου πεδίου που υιοθετήθηκε στην Εξ. 2.12, έχει ένα τοπικό χαρακτήρα για κάθε διαφορετικό περιβάλλον στο οποίο μπορεί να βρεθεί η κάθε  $i$  θέση του συστήματος με ελεύθερα και εσωτερικά όρια. Αυτό σημαίνει πως σε διμαγνητικά συστήματα διφασικού χαρακτήρα, ο υπολογισμός των μέσων όρων στις μαγνητικές ροπές στην Εξ. 2.12, γίνεται διακριτά για τις δυο διαφορετικές φάσεις. Η προσέγγιση αυτή οδηγεί σε

έναν εξαρτώμενο από την θέση απομαγνητίζοντα πίνακα.

Τέλος, η μαγνητική ανισοτροπία των νανομαγνητικών συστημάτων που μελετώνται συνοψίζεται στην κρυσταλλική (μονοαξονική) ανισοτροπία. Η κατεύθυνση των αξόνων εύκολης μαγνήτισης επιλέγεται κατάλληλα για την ακριβέστερη περιγραφή του κάθε φυσικού συστήματος. Η εισαγωγή της μονοαξονικής ανισοτροπίας στο υπολογιστικό μοντέλο πραγματοποιείται μέσω της σχέσης,

$$E_i = -K_i(\hat{S}_i \cdot \hat{e}_i)^2 \quad (2.14)$$

όπου  $\hat{e}_i$  είναι το μοναδιαίο διάνυσμα που υποδεικνύει την κατεύθυνση των αξόνων εύκολης μαγνήτισης. Η σταθερά ανισοτροπίας  $K_i$  λαμβάνει τιμές ανάλογα με το είδος του υλικού στο οποίο βρίσκεται η εκάστοτε θέση  $i$ .

## 2.2 Μέθοδος προσομοίωσης της μαγνητικής συμπεριφοράς

### 2.2.1 Η μέθοδος Monte Carlo και ο αλγόριθμος Metropolis

Η μέθοδος Monte Carlo αξιοποιείται στη μελέτη συστημάτων πολλών βαθμών ελευθερίας στην κανονική συλλογή [65, 66], δηλαδή σε θερμοδυναμική ισορροπία με γνωστή θερμοκρασία. Μέσω της μεθόδου Monte Carlo γίνεται επιλογή ενός μικρού αριθμού μικροκαταστάσεων του συστήματος. Κριτήριο για την επιλογή αυτών των καταστάσεων είναι το σύστημα να παραμένει σε αυτές για αρκετά μεγάλο χρονικό διάστημα. Κατά τον υπολογισμό των μέσων θερμικών τιμών των μακροσκοπικών ποσοτήτων ( $X$ ) του συστήματος, οι καταστάσεις αυτές εμφανίζουν μεγάλο στατιστικό βάρος και είναι καθοριστικές για το τελικό αποτέλεσμα. Η μέθοδος επιλογής αναφέρεται ως δειγματοληψία σπουδαιότητας. Προσδιορίζοντας το στατιστικό βάρος της κάθε κατάστασης, η αναμενόμενη τιμή ενός φυσικού μεγέθους  $X$  μπορεί να υπολογιστεί, ως εξής,

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_m X_m e^{-\beta E_m}}{\sum_m e^{-\beta E_m}} \rightarrow X_M = \frac{\sum_m (p_m)^{-1} X_m e^{-\beta E_m}}{\sum_m (p_m)^{-1} e^{-\beta E_m}}. \quad (2.15)$$

όπου,  $\beta=1/k_B T$ ,  $E_m$  είναι η ενέργεια της κατάστασης  $m$  και  $p_m$  είναι το στατιστικό βάρος της κατάστασης  $m$ .

Η επιλογή πεπερασμένου αριθμού καταστάσεων εισάγει σφάλμα στο τελικό

αποτέλεσμα. Καθώς αυξάνει ο αριθμός των επιλεγμένων καταστάσεων  $M$ , τόσο η τιμή  $X_M$  τείνει προς την μέση τιμή ενώ για  $M \rightarrow \infty$  προκύπτει ότι  $X_M \rightarrow \langle X \rangle$ . Ένα σύστημα που περιγράφεται από την Κανονική Συλλογή, ακολουθεί στην κατάσταση ισορροπίας την κατανομή Boltzmann [67]. Επομένως, η κατανομή αυτή μπορεί να αξιοποιηθεί στον υπολογισμό του στατιστικού βάρους της κάθε κατάστασης. Η πιθανότητα το σύστημα να βρεθεί στην κατάσταση  $m$  δίνεται από την σχέση,

$$p_m = \frac{e^{-\beta E_m}}{Z}. \quad (2.16)$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ. 2.16, προκύπτει πως η εκτίμηση της μέσης τιμής πραγματοποιείται τώρα από την σχέση,

$$X_M = \frac{\sum_m X_m}{M}. \quad (2.17)$$

Παρατηρείται πως στην τελευταία σχέση (Εξ. 2.17), ο παράγοντας Boltzmann δεν εμφανίζεται στους όρους του αθροίσματος. Μέσω αυτής της διαδικασίας, δηλαδή, η εκτίμηση της αναμενόμενης τιμής μετατράπηκε σε ένα απλό άθροισμα, ενώ ο αριθμός των καταστάσεων  $M$  είναι επαρκώς μικρός για να υπολογιστεί το εν λόγω άθροισμα. Η επιλογή των  $M$  καταστάσεων επιτυγχάνεται μέσω των στοχαστικών διαδικασιών Markov [65]. Αρχικά, κατασκευάζεται με τυχαίο τρόπο μια κατάσταση  $n$  από μια αρχική κατάσταση  $m$ . Η πιθανότητα μετάβασης από την αρχική στην τελική κατάσταση  $P(m \rightarrow n)$  παραμένει χρονικά σταθερή και εξαρτάται μόνο από τις δυο καταστάσεις μεταξύ των οποίων γίνεται η μετάβαση. Για τις πιθανότητες μετάβασης πρέπει να τηρείται η συνθήκη κανονικοποίησης,

$$\sum_n P(m \rightarrow n) = 1. \quad (2.18)$$

Η πιθανότητα  $P(m \rightarrow m)$  δεν είναι απαραίτητα μηδενική. Επίσης, το σύστημα μπορεί να βρεθεί από μια αρχική κατάσταση σε οποιαδήποτε άλλη κατάσταση (συνθήκη εργοδικότητας). Όταν το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας ισχύει για τις πιθανότητες μεταβάσεις η συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας (detailed balance),

$$p_m P(m \rightarrow n) = p_n P(n \rightarrow m). \quad (2.19)$$

Επομένως, η κατανομή Boltzmann μπορεί να επιβληθεί ως η κατανομή που ακολουθεί το σύστημα σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας,

$$\frac{P(m \rightarrow n)}{P(n \rightarrow m)} = \frac{p_n}{p_m} = e^{-\beta(E_n - E_m)}. \quad (2.20)$$

Επαναλαμβάνοντας την διαδικασία Markov πολλές φορές, κατασκευάζεται μια αλληλουχία καταστάσεων που ονομάζεται αλυσίδα Markov. Η Εξ. 2.20, αφήνει πολλά περιθώρια στην επιλογή της μορφής της πιθανότητας  $P(m \rightarrow n)$ , όπως για παράδειγμα  $P(m \rightarrow n) \sim e^{-\beta(E_m - E_n)/2}$ . Όμως, όλες οι επιλογές δε συγκλίνουν το ίδιο γρήγορα προς τη θερμοδυναμική ισορροπία. Για να γίνει αυτό κατανοητό, η πιθανότητα μετάβασης  $P(m \rightarrow n)$  γράφεται σαν γινόμενο μιας πιθανότητας επιλογής  $g(m \rightarrow n)$  της κατάστασης  $n$ , με δεδομένη την αρχική κατάσταση  $m$ , επί μια πιθανότητα αποδοχής  $A(m \rightarrow n)$  της τελικής κατάστασης  $n$ , δεδομένου ότι, αρχικά το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση  $m$ ,

$$P(m \rightarrow n) = g(m \rightarrow n)A(m \rightarrow n). \quad (2.21)$$

Έτσι, ο αλγόριθμος δύναται να μεταβληθεί, επιλέγοντας μια τυχαία διαδικασία δημιουργίας μιας νέας κατάστασης  $m$  από μια κατάσταση  $n$ , με πιθανότητα  $g(m \rightarrow n)$  και στη συνέχεια η κατάσταση  $n$  γίνεται αποδεκτή ή απορρίπτεται με πιθανότητα  $A(m \rightarrow n)$ . Ο μόνος περιορισμός είναι, να ικανοποιείται η λεπτομερής ισορροπία. Η επιλογή αυτή των νέων καταστάσεων επηρεάζει και τη σύγκλιση του αλγορίθμου. Σε ένα επιτυχή αλγόριθμο, η επιλογή των καταστάσεων πρέπει να γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε, η πιθανότητα αποδοχής να πλησιάζει τη μονάδα. Στην ισορροπία και μακριά από την κρίσιμη θερμοκρασία, οι θερμικές διακυμάνσεις είναι πολύ μικρές και η ενέργεια του συστήματος καλύπτει ένα περιορισμένο φάσμα ενεργειών. Επομένως, κατά την προσομοίωση, οι υπολογισμοί περιορίζονται εντός του μικρού αριθμού καταστάσεων του φάσματος αυτού και δεν συμπεριλαμβάνονται μεταβάσεις σε καταστάσεις που διαφέρουν ενεργειακά, κατά πολύ, από την αρχική κατάσταση. Αυτό επιτυγχάνεται, μεταβάλλοντας κάθε φορά ένα μόνο spin του συστήματος. Η τυχαία επιλογή της νέας κατάστασης πραγματοποιείται επιτυχώς μέσω του αλγορίθμου Metropolis, όπου κάθε φορά μία μόνο μαγνητική ροπή ανανεώνεται (αλλάζει κατεύθυνση). Η πιθανότητα αποδοχής ορίζεται ως

$$A(m \rightarrow n) = \begin{cases} e^{-\beta(E_m - E_n)}, & E_m - E_n > 0 \\ 1, & \text{διαφορετικά} \end{cases}. \quad (2.22)$$

Η παραπάνω σχέση συνοψίζει ουσιαστικά τον αλγόριθμό του Metropolis. Άλλες επιλογές για την ποσότητα  $A(m \rightarrow n)$ , θα μπορούσαν να είναι αποδεκτές, αλλά αποδεικνύεται ότι συγκλίνουν πολύ πιο αργά προς την ισορροπία. Σύμφωνα με τον αλγόριθμο Metropolis, αν η νέα κατάσταση είναι χαμηλότερη ενεργειακά, τότε το σύστημα θα μεταβεί στην κατάσταση αυτή. Στην αντίθετη περίπτωση, η πιθανότητα να μεταβεί το σύστημα στην νέα κατάσταση είναι μη μηδενική. Η φυσική σημασία αυτής της μη μηδενικής πιθανότητας είναι, πως το σύστημα μπορεί, λόγω θερμικών διακυμάνσεων, να μεταβεί (με μικρή πιθανότητα) και σε κάποια κατάσταση μεγαλύτερης ενέργειας, σε σχέση με την αρχική.

Στη συνέχεια, συνοψίζουμε το υπολογιστικό σχήμα που ακολουθείται στην προσομοίωση των βασικών φυσικών διεργασιών συστήματος  $N$  μαγνητικών ροπών,

1. Επιλογή αρχικού σχηματισμού των  $N$  μαγνητικών ροπών  $\hat{m}_i$ .
2. Επιλογή κατά σειρά μίας μαγνητικής ροπής  $m_i$  και μεταβολή της ( $\hat{m}_i \rightarrow m_i + \delta m_i$ ).

Η μεταβολή της ροπής πραγματοποιείται εντός κώνου στερεάς γωνίας  $\phi$  έτσι ώστε να επιτυγχάνεται μικρή μεταβολή της ενέργειας. Σε χαμηλές θερμοκρασίες η μέθοδος αυτή οδηγεί σε ταχύτερη προσέγγιση της θερμοδυναμικής ισορροπίας.

3. Υπολογισμός της μεταβολής της ολικής ενέργειας  $\Delta E$
4. Αν  $\Delta E < 0$ , αποδοχή της νέας κατάστασης
5. Αν  $\Delta E > 0$  αποδοχή με πιθανότητα  $\exp(-\Delta E/kT)$ , ακολουθώντας τα εξής βήματα:
  - Παραγωγή τυχαίου αριθμού  $r$  στο διάστημα  $(0,1)$
  - Υπολογισμός της πιθανότητας μετάβασης  $w = \exp(-\Delta E/kT)$
  - Αν  $r < w$ , αποδοχή του νέου σχηματισμού
6. Επανάληψη  $N$  φορές των βημάτων 2-5 (1 MCSS)
7. Υπολογισμός μακροσκοπικών ποσοτήτων πχ  $E$ ,  $M$  κλπ.
8. Επανάληψη των βημάτων 2-6,  $M$  φορές
9. Υπολογισμός των μέσων τιμών  $\langle X \rangle$ ,  $\langle X^2 \rangle$  και του στατιστικού σφάλματος  $\Delta X = \pm \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 / M - 1}$

Τέλος, πρέπει να σημειωθεί πως κατά την εκκίνηση της προσομοίωσης, το σύστημα βρίσκεται μακριά από την ισορροπία. Επομένως, οι αρχικές καταστάσεις δεν συνεισφέρουν στον υπολογισμό των μέσων τιμών. Πρέπει, λοιπόν, να προσδιοριστεί ο χρόνος εφησυχασμού από το διάγραμμα της χρονικής εξέλιξης ενός θερμοδυναμικού μεγέθους, έτσι ώστε να μην συμπεριλαμβάνονται οι αρχικές καταστάσεις ( $M_0$ ) στους υπολογισμούς των μέσων τιμών στην ισορροπία. Ακόμα, ο υπολογισμός των αναμενόμενων τιμών των θερμοδυναμικών μεγεθών πρέπει να γίνεται με καταστάσεις, που είναι μεταξύ τους στατιστικά ασυσχέτιστες. Για το λόγο αυτό, ορισμένος αριθμός ( $\tau$ ) MCSS παρεμβάλλονται μεταξύ των βημάτων 6 και 7 του αλγόριθμου. Τυπική τιμή είναι  $\tau \sim 10$  MCSS.

### 2.2.2 Πρωτόκολλο Προσομοίωσης

Διαφορετικά πρωτόκολλα μέτρησης των μαγνητικών ιδιοτήτων και συμπεριφοράς των υλικών ακολουθούνται κατά την πειραματική μελέτη. Σκοπός αυτών είναι να αποτυπωθούν στις πειραματικές μετρήσεις των μακροσκοπικών μεγεθών (π.χ. της μαγνήτισης του δείγματος) οι μικροσκοπικοί μηχανισμοί που επικρατούν στο εσωτερικό του υλικού και το οδηγούν σε διαφορετικές διαδρομές στο φασικό χώρο. Με τη μέθοδο προσομοίωσης MC μπορούν να αναπαραχθούν τα πρωτόκολλα μέτρησης. Παρακολουθώντας και καταγράφοντας τις θερμοδυναμικές ποσότητες καθώς το σύστημα μετατοπίζεται στο φασικό χώρο, γίνεται σύνδεση της μακροσκοπικά παρατηρούμενης συμπεριφοράς με τους μικροσκοπικούς μηχανισμούς αλληλεπίδρασης των μαγνητικών ροπών. Στη συνέχεια, παρατίθενται τα πρωτόκολλα που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα διατριβή.

#### Ψύξη Υπό Πεδίο

Αρχικά, προσομοιώνεται η διαδικασία Ψύξης υπό Πεδίο, μέσω της οποίας προσεγγίζεται η βασική κατάσταση του εκάστοτε συστήματος. Κατά τη διαδικασία αυτή, το σύστημα ψύχεται υπό σταθερό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, που αναφέρεται ως Πεδίο Ψύξης ( $H_{cool}$ ). Το μαγνητικό πεδίο είναι σχετικά ασθενές, δηλαδή, αρκετά μικρότερο από το πεδίο κορεσμού του συστήματος ( $H_{cool} \ll H_{sat}$ ). Η ψύξη πραγματοποιείται από μια αρχική υψηλή θερμοκρασία  $T_1$ , που είναι μεγαλύτερη από την κρίσιμη θερμοκρασία του συστήματος ( $T_1 > T_{crit}$ ). Στη συνέχεια, η θερμοκρασία ελαττώνεται σταδιακά κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία.

## Ισόθερμη Υστέρηση

Πέρα από τη μελέτη της βασικής κατάστασης πραγματοποιείται μελέτη και της υστέρησης αλλά και της δυναμικής της μαγνήτισης των συστημάτων. Ξεκινώντας από τη βασική κατάσταση, το εξωτερικό πεδίο μεταβάλλεται μεταξύ των τιμών  $-H_{cool} < H < +H_{cool}$  και προκύπτει ο βρόχος υστέρησης. Ο λόγος του βήματος του πεδίου προς τον αριθμό των MCSS παραμένει σταθερός, έτσι ώστε τα αποτελέσματα να εξαρτώνται μόνο από τα χαρακτηριστικά της δομής. Στη συνέχεια, υπολογίζονται τα χαρακτηριστικά πεδία υστέρησης των συστημάτων, δηλαδή το συνεκτικό πεδίο  $H_c$  και το πεδίο πόλωσης-ανταλλαγής  $H_{eb}$  στα διφασικά συστήματα. Μέσω του βρόχου υστέρησης, λαμβάνονται τα μακροσκοπικά χαρακτηριστικά των μαγνητικών συστημάτων.

Τέλος, έχοντας ως σημείο εκκίνησης πάλι τη βασική κατάσταση, πραγματοποιείται αντιστρέφοντας το εξωτερικό πεδίο ( $H_{cool} \rightarrow -H_{cool}$ ), μελέτη της δυναμικής της μαγνήτισης καταγράφοντας το μηχανισμό της αντιστροφής της μαγνήτισης και την διάδοση των μαγνητικών τοιχωμάτων. Μέσω αυτής της περιγραφής αναδεικνύονται μικροσκοπικά χαρακτηριστικά των μαγνητικών νανοσυρμάτων.

## Δυναμική ερμηνεία του αλγόριθμου Metropolis

Η μέθοδος MC αποτελεί, εξ'ορισμού, μία μέθοδο περιγραφής της θερμοδυναμικής ισορροπίας ενός συστήματος μέσω ελαχιστοποίησης της ολικής (ελεύθερης) ενέργειας του συστήματος. Ως εκ τούτου δεν λαμβάνει υπόψη τη δυναμική εξέλιξη της μαγνήτισης παρά μόνο την ενεργειακή διαφορά μεταξύ αρχικής και τελικής κατάστασης του συστήματος. Συνέπεια αυτού του γεγονότος είναι αφενός να αγνοείται η περιστροφική κίνηση της μαγνήτισης γύρω από το τοπικό πεδίο, ενώ προσομοιώνεται μόνο η σταδιακή ευθυγράμμιση της ροπής προς το τοπικό πεδίο (απόσβεση). Συνέπεια των ανωτέρω, όσον αφορά την περιγραφή της δυναμικής των μαγνητικών τοιχωμάτων, είναι η μέθοδος προσομοίωσης MC να αποδίδει ικανοποιητικά μόνο το γραμμικό τμήμα της σχέσης ταχύτητας - πεδίου (Κεφάλαιο 1, Σχ.1.20) [49, 68], δηλαδή την περιοχή διάχυσης των τοιχωμάτων, ενώ το όριο Walker δεν μπορεί να περιγραφεί μιας και καθοριστικό ρόλο σε αυτό παίζει η περιστροφική κίνηση της μαγνήτισης κατά την μετάπτωσή της γύρω από το τοπικό πεδίο.



## Κεφάλαιο 3

# Φαινόμενο Πόλωσης - Ανταλλαγής σε διμαγνητικά νανοσύρματα

### 3.1 Εισαγωγή

Η ανάπτυξη μεθόδων ηλεκτρικής απόθεσης [47, 69] και χημικών μεθόδων παρασκευής μαγνητικών υλικών [70, 71] έχουν επιτρέψει το σχεδιασμό και την σύνθεση σχεδόν μονοδιάστατων μαγνητικών νανοδομών, όπως τα μαγνητικά νανοσύρματα και οι νανοσωλήνες. Τα συστήματα αυτά χαρακτηρίζονται από την ενισχυμένη (μαγνητοστατικής προέλευσης) ανισοτροπία σχήματος, που τα καθιστά υποψήφια υλικά για προηγμένες τεχνολογίες που ποικίλουν από διατάξεις μαγνητικής εγγραφής [16] έως και εφαρμογές βιοϊατρικής [43, 44].

Το σχεδόν μονοδιάστατο σχήμα τους, οδηγεί σε σύνθετο μηχανισμό αντιστροφής της μαγνήτισης, που αποτελείται από το σχηματισμό μαγνητικών τοιχωμάτων στα άκρα του σύρματος και τη διάδοσή τους προς το κέντρο όπου συγχωνεύονται για την πλήρη αντιστροφή της μαγνήτισης [16, 47, 48]. Ακόμα, έχει διαπιστωθεί πως η διάμετρος των σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων ελέγχει τον χαρακτήρα των μαγνητικών τοιχωμάτων [49, 50, 72]. Συγκεκριμένα, η μετάβαση από εγκάρσιο μαγνητικό τοίχωμα σε μαγνητικό τοίχωμα τύπου δίνης πραγματοποιείται όταν η διάμετρος του σύρματος αυξηθεί πέρα από το μήκος ανταλλαγής. Η μετάβαση αυτή, επιφέρει σημαντικές διαφοροποιήσεις στην ευκινησία διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων [50], αναδεικνύοντας δυνατότητες ελέγχου των μαγνητικών ιδιοτήτων των νανοσυρμάτων μέσω των γεωμετρικών τους χαρακτηριστικών. Τα μαγνητικά νανοσύρματα διαθέτουν, λοιπόν, την κατάλληλη γεωμετρία για επαρκή

έλεγχο του σχηματισμού και της διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων με πιθανές εφαρμογές σε συστήματα τρισδιάστατης μαγνητικής μνήμης [21].

Μια υποσχόμενη εναλλακτική μέθοδος διαμόρφωσης της μαγνητικής ανισοτροπίας νανοδομών προσφέρεται από το φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής (ΦΠΑ, exchange - bias effect) [25, 26, 28, 29]. Σε αντίθεση με τις πολύ σημαντικές ερευνητικές προσπάθειες που έχουν πραγματοποιηθεί για την μελέτη του ΦΠΑ σε συζευγμένα σιδηρομαγνητικά (ΣΔ) / αντισιδηρομαγνητικά (ΑΣ) στρώματα [27] και στα αντίστοιχα διμαγνητικά νανοσωματίδια [29], το πεδίο των συζευγμένων ΣΔ / ΑΣ νανοσυρμάτων παραμένει σχετικά ανεξερεύνητο. Επιμήκης νανοδομές με μορφολογία ΣΔ πυρήνα / ΑΣ φλοιού, όπως τα νανοςύρματα [73, 74, 75] και οι νανοσωλήνες [76, 77], έχουν μελετηθεί λιγότερο. Παρ' όλα αυτά, οι δομές αυτές αποδείχθηκε πως παρουσιάζουν το ΦΠΑ και τα φαινόμενα που το συνοδεύουν, καταδεικνύοντας πως η παρουσία του φαινομένου είναι εφικτή και σε αυτές τις γεωμετρίες. Οι Maurer *et al* [73], συνέκριναν τις ιδιότητες υστέρησης κυλινδρικών νανοσυρμάτων Co και διμαγνητικών νανοσυρμάτων Co/CoO και διαπίστωσαν συρρίκνωση του συνεκτικού πεδίου εξαιτίας της επιφανειακής οξειδωσης καθώς και μια ανώμαλη εξάρτηση από την θερμοκρασία. Οι παρατηρήσεις αυτές αποδόθηκαν σε διακυμάνσεις που εισάγονται από τον οξειδωμένο φλοιό. Η μελέτη αυτή, παρέχει επιπρόσθετα στοιχεία που ενισχύουν τη θεώρηση ότι το ΦΠΑ διαμορφώνει ριζικά τον μηχανισμό αντιστροφής της μαγνήτισης των μαγνητικών νανοσυρμάτων. Τέλος, υβριδικά νανοςύρματα και νανοσωλήνες που παρουσιάζουν το ΦΠΑ αναπτύχθηκαν πρόσφατα [78, 79, 80], κάτι που δεν είχε επιτευχθεί σε επιμήκεις νανοδομές.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη του ανταγωνισμού μεταξύ διαφορετικών μορφών ανισοτροπίας που εμφανίζονται σε διμαγνητικά νανοςύρματα, όπως της μονοαξονικής που εισάγει η διαδικασία ψύξης υπό πεδίο αλλά και της ανισοτροπίας σχήματος. Οι Salazar-Alvarez *et al* [81] μελέτησαν τη δυνατότητα ελέγχου της υψηλού πεδίου μαγνήτισης σε επιφανειακά οξειδωμένα νανοςύρματα Co στην κάθετη στα νανοςύρματα διεύθυνση, χρησιμοποιώντας το ΦΠΑ. Σε μια αναζήτηση για βέλτιστη διεύθυνση εξωτερικού πεδίου με σκοπό την ενίσχυση του ΦΠΑ, οι Tripathy *et al* [74] ερεύνησαν την γωνιακή εξάρτηση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής νανοσυρμάτων Co/CoO που αναπτύχθηκαν με λιθογραφικές μεθόδους και έδειξαν αύξηση του πεδίου αυτού σε διευθύνσεις εκτός του μεγάλου άξονα των νανοσυρμάτων. Οι Gandha *et al* [75] κατέγραψαν ισχυρό ΦΠΑ σε χημικώς ανεπτυγμένα νανοςύρματα Co/CoO. Το φαινόμενο παρατηρήθηκε, ξανά, ενισχυμένο

σε διευθύνσεις εκτός του μεγάλου άξονα των νανοσυρμάτων. Πιο πρόσφατα, οι Allende *et al* [82] έδειξαν, πως η πυρήνωση και η διάδοση των εγκάρσιων μαγνητικών τοιχωμάτων στα σιδηρομαγνητικά νανοσύρματα εξαρτάται άμεσα από την ισχύ και την διεύθυνση του εξωτερικού πεδίου. Τέλος, η επίδραση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού σε διστρωματικά υμένα Co/CoO, μελετήθηκε πειραματικά [83] και αποδείχθηκε πως προκαλεί ενίσχυση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής. Ενδιαφέρον λοιπόν, προκαλεί η μελέτη της επίδρασης του πολυκρυσταλλικού φλοιού διμαγνητικών νανοσυρμάτων στο συνεκτικό πεδίο, στο πεδίο πόλωσης ανταλλαγής αλλά και στη γωνιακή εξάρτηση αυτών των πεδίων με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

Ο ανταγωνισμός μεταξύ ανισοτροπιών διαφορετικής ισχύος και συμμετρίας έχει μελετηθεί θεωρητικά χρησιμοποιώντας το μοντέλο σύμφωνης στροφής των Stoner-Wohlfarth [84, 85], όπου υπολογίστηκαν ασυνεχείς μεταβάσεις του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής και του συνεκτικού πεδίου σε συγκεκριμένες γωνίες, που καθορίζονται από τους άξονες εύκολης μαγνήτισης του συστήματος. Εξαιτίας του καθοριστικού ρόλου που παίζει η δομή *spin* της ενδοεπιφάνειας στο ΦΠΑ [28], απαιτείται μια πιο ρεαλιστική περιγραφή της δομής και της δυναμικής του αντισιδηρομαγνητικού στρώματος του φλοιού.

Οι αριθμητικές μελέτες των χαρακτηριστικών υστέρησης σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων [86, 87] βασίζονται συνήθως στη μικρομαγνητική προσέγγιση [88]. Οι μικρομαγνητικές μελέτες του ΦΠΑ σε διμαγνητικά συστήματα συνήθως υιοθετούν την προσέγγιση ενός "παγωμένου πεδίου" [73, 89] για την περιγραφή της επίδρασης του αντισιδηρομαγνητικού τμήματος (Σχ.1.4). Η προσέγγιση αυτή, όμως, αμελεί πλήρως τις θερμικές διακυμάνσεις και την μικροσκοπική δομή του αντισιδηρομαγνήτη. Στον αντίποδα της προσέγγισης "παγωμένου πεδίου", η δυναμική της μαγνήτισης και των δυο φάσεων σε συζευγμένα διμαγνητικά συστήματα έχει μελετηθεί μέσω ατομιστικών προσεγγίσεων [90]. Παρ' όλα αυτά, οι συγκεκριμένες μέθοδοι δίνουν την δυνατότητα μελέτης πολύ μικρότερων συστημάτων εξαιτίας της πολύ μεγάλης υπολογιστικής ισχύος που απαιτείται για να μοντελοποιηθούν συστήματα με τυπικά μεγέθη  $\approx 1\mu m$ . Η μέθοδος Monte Carlo έχει αποδειχθεί πολύ εύχρηστη και αξιόπιστη στη μελέτη της επίδρασης των θερμικών φαινομένων στη δυναμική της μαγνήτισης σύνθετων νανοδομών [29] όπως και των απομονωμένων σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων [49]. Επίσης, οι Hinzke και Nowak παρέχουν αριθμητικά στοιχεία για την αντιστοιχία της μεθόδου Monte Carlo και της πλήρους δυναμικής μεθόδου που βασίζεται στην ολοκλήρωση των εξισώσεων

Landau-Lifshitz-Gilbert στο όριο της υψηλούς μετάπτωσης [49].

Στο κεφάλαιο αυτό, χρησιμοποιείται η μέθοδος Monte Carlo για να προσεγγίσουμε τις θερμικές διακυμάνσεις και να μοντελοποιήσουμε τη συμπεριφορά υστέρησης κυλινδρικών νανοσυρμάτων μορφολογίας ΣΔ πυρήνα / ΑΣ φλοιού, πηγαίνοντας πέρα από την προσέγγιση του "παγωμένου πεδίου" για την μελέτη του ΦΠΑ [55, 56, 57, 58, 59]. Μελετούμε σε μικροσκοπικό επίπεδο τον ανταγωνισμό μεταξύ του ΦΠΑ και της διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων κατά την αντιστροφή της μαγνήτισης μέσω εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Επίσης, μελετάμε την επίδραση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού στη συμπεριφορά του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής σε κυλινδρικά νανοςύρματα που αποτελούνται από μονοκρυσταλλικό πυρήνα Co και πολυκρυσταλλικό φλοιό CoO [91, 92, 93, 94, 95]. Τέλος, εστιάζουμε στην επίδραση της ενδοεπιφανειακής σύζευξης ανταλλαγής και της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού στην μετάβαση μεταξύ διαφορετικών τρόπων αντιστροφής της μαγνήτισης καθώς μεταβάλλεται η διάμετρος των νανοσυρμάτων [96].

### 3.2 Μοντελοποίηση και μέθοδος προσομοίωσης

Τα νανοςύρματα κατασκευάζονται αποκόπτοντας κυλίνδρους ακτίνας  $R$  και μήκους  $L$  από απλό κυβικό (sc) πλέγμα με πλεγματική σταθερά  $a$  [55, 56, 57, 58, 59]. Για την μορφολογία πυρήνα / φλοιού προσδιορίζουμε ένα εσωτερικό ομοαξονικό κύλινδρο με ακτίνα  $R_c = R - t$  και μήκος  $L_c = L - t$ , που αποτελεί τον πυρήνα του συστήματος. Ο πυρήνας περιβάλλεται από τον εξωτερικό φλοιό πάχους  $t$ . Οι μικροσκοπικές λεπτομέρειες της δομής στην ενδοεπιφάνεια είναι μείζονος σημασίας για την μελέτη του ΦΠΑ, καθώς καθορίζουν τον αριθμό των μη ισοσταθμισμένων μαγνητικών ροπών του συστήματος [97, 98]. Ο αριθμός των ροπών αυτών προσδιορίζεται μετρώντας τις "πάνω" και "κάτω" ροπές του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού  $N_u = N_+ - N_-$  στην ενδοεπιφάνεια. Οποιοσδήποτε μεταβολές της δομής στην ενδοεπιφάνεια διαμορφώνουν τον αριθμό των μη ισοσταθμισμένων ροπών. Στο παρόν κεφάλαιο μελετώνται μοντέλα με διαφορετικά δομικά χαρακτηριστικά Σχ.3.1, στα οποία μεταβάλλεται ο βαθμός ισοστάθμισης της ΣΔ / ΑΣ ενδοεπιφανείας με δυο τρόπους [55, 56, 57, 58, 59]: (i) Εισάγοντας ενδοεπιφανειακή τραχύτητα σε ατομικό επίπεδο. Αυτό επιτυγχάνεται αναμειγνύοντας με τυχαίο τρόπο μαγνητικές ροπές της σιδηρομαγνητικής φάσης με μαγνητικές ροπές της αντισιδηρομαγνητικής φάσης στην ενδοεπιφάνεια. Μέσω αυτής της διαδικασίας αντικαθί-

σταται η ιδανική ενδοεπιφάνεια  $A|B$  από ένα τυχαίο κράμα  $A_{1-x}B_x|B_{1-x}A_x$ , όπου ο βαθμός ανάμειξης είναι  $x = 0.5$ , έτσι ώστε να προκύπτει ο μέγιστος αριθμός μη ισοσταθμισμένων μαγνητικών ροπών στην ενδοεπιφάνεια. (ii) Αποκόπτοντας το νανόσυρμα κατά μήκος της  $[011]$  διεύθυνσης του απλού κυβικού πλέγματος. Σε αυτή τη δομή προκύπτει μια έντονα μη ισοσταθμισμένη ενδοεπιφάνεια, καθώς διαδοχικές ΑΣ ροπές κατά μήκος του z-άξονα ανήκουν στο ίδιο υπόπλεγμα. Πέρα όμως από τα συστήματα διαφορετικής ενδοεπιφανειακής τραχύτητας μεταβάλλεται η μαγνητική τάξη του φλοιού και με έναν ακόμα τρόπο. Πιο συγκεκριμένα κατασκευάζονται διφασικά νανοσύρματα ΣΔ πυρήνα και πολυκρυσταλλικού ΑΣ φλοιού [91, 92, 93, 94, 95]. Η πολυκρυσταλλικότητα του φλοιού προσεγγίζεται χωρίζοντας τον σε  $N_z$  κυλινδρικές φέτες κατά μήκος του z-άξονα ενώ κάθε φέτα χωρίζεται σε  $N_\phi$  τμήματα. Με αυτό τον τρόπο ο φλοιός διαχωρίζεται σε  $N_g = N_z \cdot N_\phi$  πανομοιότυπους κρυσταλλίτες πλάτους  $w_g = L/N_z$ . Τα νανοσύρματα απεικονίζονται στο Σχ. 3.1.

Η ολική ενέργεια του μαγνητικού συστήματος περιγράφεται μέσω της σχέσης,

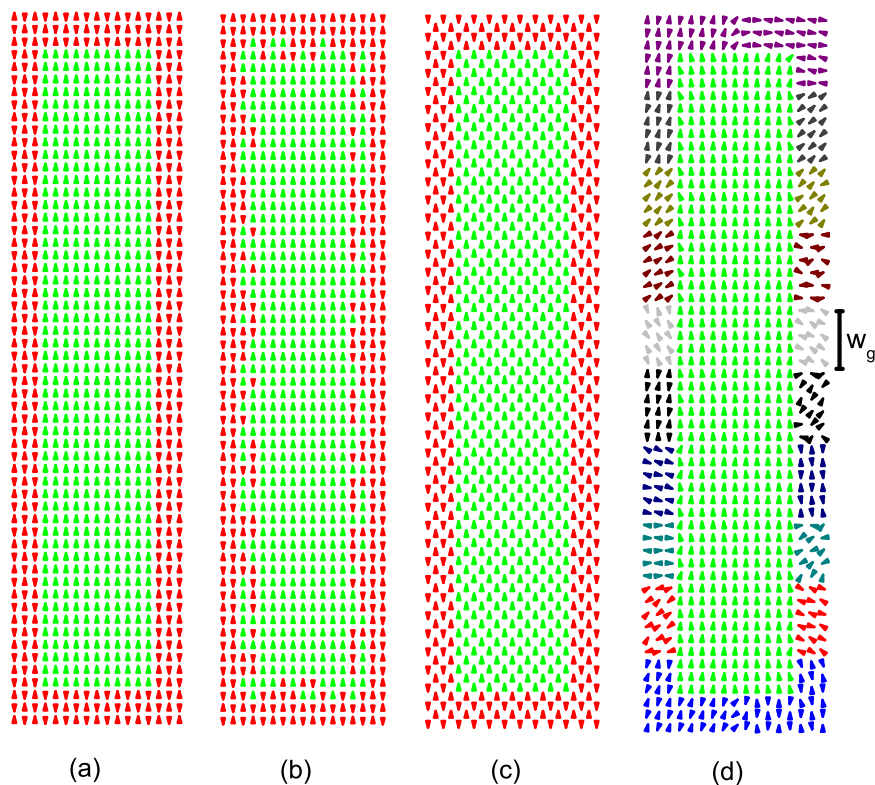
$$E = \sum_i E_i \quad (3.1)$$

όπου η μονοατομική ενέργεια δίνεται από τη σχέση,

$$E_i = -\frac{1}{2} \hat{m}_i \cdot \sum_{\langle j \rangle} J_{ij} \hat{m}_j - K_i (\hat{m}_i \cdot \hat{e}_i)^2 - H (\hat{m}_i \cdot \hat{H}) - \frac{1}{2} g \hat{m}_i \cdot \sum_j W_{ij} \cdot \hat{m}_j. \quad (3.2)$$

Στην Εξ. (3.2) τα καπελάκια υποδεικνύουν μοναδιαία διανύσματα σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Ο παράγοντας  $1/2$  μπροστά από τον πρώτο και τέταρτο όρο της Εξ. (3.2) ισοσταθμίζει, κατά τους υπολογισμούς της ολικής ενέργειας Εξ. (3.1), τη διπλή προσμέτρηση μαγνητικών ροπών.

Ο πρώτος όρος της Εξ. (3.2) είναι η ενέργεια ανταλλαγής μεταξύ πρώτων γειτόνων (1nn). Η σταθερά ανταλλαγής  $J_{ij}$  παίρνει τις τιμές  $J_{\Sigma\Delta}$ ,  $J_{A\Sigma}$  και  $J_{int}$  ανάλογα με την περιοχή, σιδηρομαγνητική, αντισιδηρομαγνητική και ενδοεπιφάνεια αντίστοιχα, στην οποία βρίσκονται οι θέσεις των κόκκων  $i$  και  $j$ . Η τελευταία παράμετρος αναφέρεται σε θέσεις του πυρήνα (φλοιού) που έχουν δεσμούς ανταλλαγής με κόκκους του φλοιού (πυρήνα). Για τις αλληλεπιδράσεις πλησιέστερων γειτόνων, η περιοχή της ενδοεπιφάνειας έχει πλάτος  $2a$  και αποτελείται από ένα



Σχήμα 3.1: Επιμήκειες διατομές για διαφορετικά δομικά μοντέλα κυλινδρικών νανοσυρμάτων με λόγο διαστάσεων 5:1. Μέσω του χρωματικού κώδικα διακρίνονται οι θέσεις των κόκκων του σιδηρομαγνητικού πυρήνα (ανοιχτό πράσινο) από εκείνες του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού (κόκκινο). Τα βέλη δείχνουν τη διάταξη των μαγνητικών ροπών στην κατάσταση ψύξης υπό πεδίο. (a)  $\Delta M[001]$ , (b)  $\Delta M[001]$  με 50% ανάμειξη των επιφανειακών θέσεων, (c)  $\Delta M[011]$  με ενδοεπιφανειακό στρώμα φλοιού που αποτελείται από αντισιδηρομαγνητικές ροπές που ανήκουν στο ίδιο μαγνητικό υπόπλεγμα (ροπές προς τα πάνω) και οδηγεί σε μια πλήρως μη ισοσταθμισμένη επιφάνεια, (d) ΠΣ-60 ( $[001]$ ) με πολυκρυσταλλικό φλοιό που αποτελείται από  $N_g = 60$  ( $N_z = 10, N_\phi = 6$ ) κρυσταλλίτες πλάτους  $w_g \approx 5.6a$ . Παράμετροι:  $R_c = 5a, L_c = 50a$  και  $t_{sh} = 3a$  [55, 56, 57, 58, 59, 91, 92, 93, 94, 95].

στρώμα του πυρήνα και από ένα στρώμα του φλοιού.

Ο δεύτερος όρος της Εξ. (3.2) είναι η ενέργεια μονοαξονικής ανισοτροπίας. Οι άξονες εύκολης μαγνήτισης  $\hat{e}_i$  των ατόμων του πυρήνα επιλέγονται κατά μήκος του μεγάλου άξονα του κυλίνδρου. Τα άτομα του φλοιού στα συστήματα μονοκρυσταλλικού (ιδανικού) φλοιού έχουν επίσης άξονα εύκολης μαγνήτισης παράλληλο με το μεγάλο άξονα του κυλίνδρου. Η κατάσταση αυτή διαφοροποιείται στα συστήματα πολυκρυσταλλικού φλοιού. Οι κόκκοι του φλοιού που ανήκουν στον ίδιο

κρυσταλλίτη έχουν κοινό άξονα εύκολης μαγνήτισης. Η διεύθυνση του άξονα επιλέγεται τυχαία, ενώ μεταξύ διαφορετικών κρυσταλλιτών η επιλογή αυτή διαφέρει, έτσι ώστε κάθε κρυσταλλίτης να έχει και μία διαφορετική διεύθυνση στην οποία ελαχιστοποιείται η ενέργεια ανισοτροπίας. Με αυτό τον τρόπο προσομοιώνεται ικανοποιητικά η πολυκρυσταλλικότητα του φλοιού. Η σταθερά ανισοτροπίας  $K_i$  παίρνει τις τιμές  $K_{\Sigma\Delta}$  και  $K_{A\Sigma}$  ανάλογα με την θέση του ατόμου  $i$ .

Ο τρίτος όρος στην Εξ. (3.2) είναι η ενέργεια Zeeman που οφείλεται στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο έντασης  $H$  και ο τελευταίος όρος είναι η ενέργεια των διπολικών αλληλεπιδράσεων έντασης  $g$ . Ο ακριβής υπολογισμός των διπολικών αλληλεπιδράσεων, πραγματοποιείται σύμφωνα με τη μέθοδο που αναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 2. Η γενική μέθοδος τροποποιείται μόνο για την περιγραφή των δυο διαφορετικών φάσεων που συνθέτουν τα νανοσύρματα έτσι ώστε, ο διαφοσικός χαρακτήρας των διμαγνητικών νανοσυρμάτων να είναι διακριτός κατά τον υπολογισμό του "μακρινού πεδίου" στην προσέγγιση μέσου πεδίου (Εξ. (2.12)). Πιο συγκεκριμένα το "μακρινό-πεδίο" υπολογίζεται ως,

$$\sum_{j, r_{ij} > r_0} W_{ij} \cdot \hat{m}_j \approx w_i^{\Sigma\Delta} \cdot \langle \hat{m} \rangle_{\Sigma\Delta} + w_i^{A\Sigma} \cdot \langle \hat{m} \rangle_{A\Sigma} \quad (3.3)$$

όπου

$$w_i^{\Sigma\Delta(A\Sigma)} = \sum_{\substack{j \in \Sigma\Delta(A\Sigma) \\ r_{ij} > r_0}} W_{ij} \quad (3.4)$$

είναι ο  $3 \times 3$  απομαγνητίζων πίνακας της θέσης  $i$  και  $\langle \hat{m} \rangle_{\Sigma\Delta(A\Sigma)}$  είναι η μέση μαγνητική ροπή της  $\Sigma\Delta$  ( $A\Sigma$ ) περιοχής του διμαγνητικού νανοσύρματος.

Για να παρατηρήσουμε το φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής στα διμαγνητικά νανοσύρματα εφαρμόζουμε τη διαδικασία ψύξης υπό πεδίο από μια υψηλή θερμοκρασία ( $T \gg T_c$ ) σε μια χαμηλή θερμοκρασία ( $T \ll T_N$ ), ενώ το πεδίο είναι μικρότερο από το πεδίο κορεσμού της  $A\Sigma$  φάσης ( $H_{cool} \ll H_{sat}$ ). Χρησιμοποιώντας αυτή την κατάσταση ως αρχική, υπολογίζεται ο ισόθερμος βρόχος υστέρησης, εναλλάσσοντας το εξωτερικό πεδίο μεταξύ των τιμών ( $-H_{cool} \leq H \leq +H_{cool}$ ) με σταθερό ρυθμό. Το συνεκτικό πεδίο υπολογίζεται από την σχέση  $H_c = |H_{c1} - H_{c2}|/2$  και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής από την  $H_{eb} = |H_{c1} + H_{c2}|/2$ , όπου  $H_{c1}$  και  $H_{c2}$  είναι τα συνεκτικά πεδία που αντιστοιχούν στο αρνητικό (πχ αντίθετα στη διεύθυνση του εξωτερικού πεδίου) και στο θετικό πεδίο του βρόχου, αντίστοιχα. Η ψύξη υπό πεδίο ξεκινάει από θερμοκρασία  $T_H = 2.00J_{\Sigma\Delta}$  και καταλήγει σε θερμοκρασία  $T_L = 0.01J_{\Sigma\Delta}$  ενώ το εξωτερικό πεδίο είναι ίσο με  $H_{cool} = 0.4J_{\Sigma\Delta}$ . Το βήμα

μεταβολής της θερμοκρασίας είναι  $\Delta T = 0.02J_{\Sigma\Delta}$ . Οι δοκιμαστικές μεταβολές των ροπών περιορίζονται σε ένα κώνο γωνίας  $\sim 3^\circ$  γύρω από την αρχική διεύθυνση της ροπής, καταλήγοντας σε ένα ρυθμό αποδεκτών μεταβολών της τάξης του 40-60%. Με αυτό τον τρόπο επιταχύνεται η επίτευξη ισορροπίας [99]. Ο θερμικός μέσος όρος υπολογίζεται πάνω σε  $N_{rs} = 10$  ανεξάρτητες ακολουθίες εφησυχασμού, ενώ η κάθε μία αποτελείται από  $M_0 = 0.5 \times 10^4$  βήματα Monte Carlo ανά ροπή (MCSS) για θέρμανση και  $M = 10^4$  MCSS για υπολογισμούς των θερμοδυναμικών μεγεθών. Οι υπολογισμοί πραγματοποιούνται κάθε  $\tau = 10$  MCSS για να ελαχιστοποιηθούν οι συσχετισμοί μεταξύ των διαφορετικών καταστάσεων. Κατά το σχηματισμό των βρόχων υστέρησης ο ρυθμός μεταβολής του πεδίου διατηρείται σταθερός,  $r_H = 10^{-5}J_{\Sigma\Delta}/\text{MCSS}$ , για να αποκλειστεί η εξάρτηση των αποτελεσμάτων από τον χρόνο μέτρησης. Τέλος, για τα συστήματα διαφορετικής αταξίας τα αποτελέσματα προκύπτουν από το μέσο όρο  $N_c = 25$  διαφορετικών δειγμάτων. Κατά τον υπολογισμό των διπολικών πεδίων χρησιμοποιούμε ακτίνα εμβέλειας  $r_0 = 3a$ , που εισάγει σφάλμα στον υπολογισμό μικρότερο του 1% στην ολική ενέργεια ενός ομοιογενώς μαγνητισμένου σιδηρομαγνητικού νανοσύρματος.

Χρησιμοποιούνται τυπικές μικρομαγνητικές παράμετροι για το Co  $A = 1.3 \cdot 10^{-11} J/m$ ,  $M_s = 1.4 \cdot 10^6 A/m$ , και  $K_u = 3 \cdot 10^5 J/m^3$  [100, 101]. Στην προσομοίωση όλες οι ενεργειακές παράμετροι της Εξ.(3.2) έχουν βαθμονομηθεί με βάση την σταθερά ανταλλαγής  $J_{\Sigma\Delta}$ , που για αριθμητική ευκολία παίρνει την τιμή  $J_{\Sigma\Delta} = 1$ . Οι τιμές που παίρνουν οι παράμετροι είναι,  $J_{A\Sigma} = -0.5J_{\Sigma\Delta}$ ,  $J_{int} = -0.5J_{\Sigma\Delta}$ ,  $K_{\Sigma\Delta} = 0.1J_{\Sigma\Delta}$ ,  $K_{A\Sigma} = 1.0J_{\Sigma\Delta}$  και  $g = 0.05J_{\Sigma\Delta}$ . Αυτές οι παράμετροι αντιστοιχούν στις μικρομαγνητικές παραμέτρους των συστημάτων Co/CoO που είναι συζευγμένα με αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής, όπως παλαιότερες μικρομαγνητικές μελέτες έχουν δείξει [29, 98]. Με αυτό τον τρόπο το απλό κυβικό πλέγμα της παρούσας μικρομαγνητικής προσομοίωσης αντιστοιχεί σε ένα πλέγμα κόκκων με πλευρές μήκους  $a = 3\text{nm}$ , που είναι μικρότερο από το εκτιμημένο μήκος ανταλλαγής του Co,  $\lambda \approx 3.3\text{nm}$ . Το υλικό του φλοιού είναι οξειδίο του κοβαλτίου (CoO), για το οποίο θεωρούμε ισχυρή ενεργό ανισοτροπία  $K_{u,CoO} = 10K_{u,Co}$  και ελαττωμένη σταθερά ανταλλαγής  $A_{CoO} = 0.5A_{Co}$ , όπως υπαγορεύει η σχέση μεταξύ των κρίσιμων θερμοκρασιών  $T_N \sim 0.5T_C$ . Η μεγάλη τιμή της ανισοτροπίας του φλοιού ( $K_{A\Sigma} \simeq J_{A\Sigma}$ ) που χρησιμοποιείται, όπως και σε άλλες μελέτες αντίστοιχων συστημάτων [29, 98], δικαιολογείται από την χαμηλή συμμετρία της ελεύθερης επιφάνειας που προκύπτει λόγω του ιδιαίτερα μικρού πάχους του φλοιού [98]. Επίσης, υποθέτουμε, για λόγους απλότητας, ότι οι μαγνητικές ροπές της σιδηρομαγνητι-



Πίνακας 3.1: Δομικά χαρακτηριστικά νανοσυρμάτων μορφολογίας πυρήνα / φλοιού με  $R_c = 5a$ ,  $L_c = 50a$  και  $t_{sh} = 3a$ .  $N$  = ολικός αριθμός κόκκων των νανοσυρμάτων,  $N_c$  = αριθμός κόκκων του πυρήνα και  $N_u$  = αριθμός μη ισοσταθμισμένων μαγνητικών ροπών [55, 56, 57, 58, 59].

System	$N$	$N_c$	$N_u$
ΣΔ[001]	4131	4131	-
ΔΜ[001]	11229	4131	2
ΔΜr[001]	11229	4168 <sup>(1)</sup>	27 <sup>(1)</sup>
ΣΔ[011]	3867	3867	-
ΔΜ[011]	11021	3867	66

<sup>(1)</sup> Μέση τιμή 25 διαφορετικών τυχαίων συστημάτων με ενδοεπιφανειακή τραχύτητα.

κής και αντισιδηρομαγνητικής φάσης είναι ίσες ( $\mu_F = \mu_{A\Sigma}$ ), οπότε οι παράμετροι  $H$  και  $g$  γίνονται ανεξάρτητες της θέσης. Τέλος, για την παράμετρο  $J_{int}$ , εξαιτίας της έλλειψης πειραματικών δεδομένων, επιλέγουμε την τιμή  $J_{int} \approx J_{A\Sigma}$  που έχει χρησιμοποιηθεί σε άλλες μελέτες [29, 98].

### 3.3 Αριθμητικά Αποτελέσματα

#### 3.3.1 Μελέτη νανοσυρμάτων με μονοκρυσταλλικό φλοιό

Στην παρούσα ενότητα θα αναφερθούμε στην επίδραση του ιδανικού αντισιδηρομαγνητικού φλοιού αλλά και της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας στο μηχανισμό αντιστροφής της μαγνήτισης. Τα νανοσύρματα κατασκευάζονται σύμφωνα με το υπολογιστικό μοντέλο που περιεγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα και απεικονίζονται στο Σχ. 3.1(a, b, c). Τα δομικά χαρακτηριστικά των συστημάτων αυτών συνοψίζονται στον Π. 3.1.

#### Ισόθερμη Υστέρηση

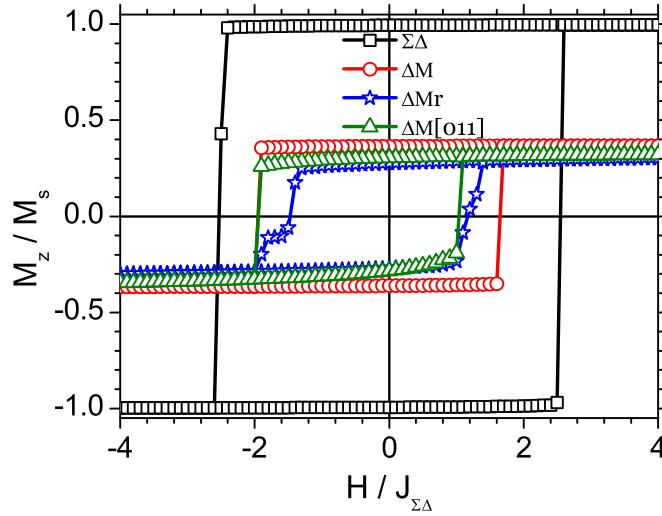
Αρχικά, μελετούμε τη μακροσκοπική μαγνητική συμπεριφορά των νανοσυρμάτων, υπολογίζοντας τους βρόχους υστέρησης και τα χαρακτηριστικά τους πεδία, δηλαδή τα πεδία  $H_c$  and  $H_{eb}$ . Στο Σχ. 3.2 συγκρίνουμε τους χαμηλής θερμοκρασίας βρόχους υστέρησης αμιγώς σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων με εκείνους

των διμαγνητικών νανοσυρμάτων με διαφορετικές ενδοεπιφανειακές μικροδομές ( $\Delta M[001]$ ,  $\Delta M[001]$ ,  $\Delta M[011]$ ). Οι διαστάσεις του σιδηρομαγνητικού πυρήνα είναι οι ίδιες και για τα τρία συστήματα.

Τα βασικά χαρακτηριστικά αυτών των αποτελεσμάτων είναι μια ουσιαστική ελάττωση του συνεκτικού πεδίου ( $H_c$ ) των διμαγνητικών νανοσυρμάτων συγκριτικά με του σιδηρομαγνητικού νανοσύρματος και η ανάδειξη ενός ασθενούς πεδίου πόλωσης ανταλλαγής, που οδηγεί τελικά στην ενθυλάκωση των βρόχων των διμαγνητικών συστημάτων εντός του βρόχου του σιδηρομαγνητικού νανοσύρματος. Η επίδραση του ιδανικού ΑΣ φλοιού στις μαγνητικές ιδιότητες των ΣΔ νανοσυρμάτων, μπορεί αρχικά να εξαχθεί συγκρίνοντας τις ιδιότητες του ΣΔ νανοσύρματος, και του διμαγνητικού νανοσύρματος με ιδανικό φλοιό.

Η δραστική ελάττωση του συνεκτικού πεδίου  $H_c$ , προκύπτει εξαιτίας της παρουσίας των μη ικανοποιημένων δεσμών στην ενδοεπιφάνεια του ΑΣ φλοιού. Πιο συγκεκριμένα, τα "ατομικά" επίπεδα των κυλινδρικών νανοσυρμάτων που βρίσκονται κατά μήκος του z-άξονα σε ένα ιδανικό αντισιδηρομαγνητικό φλοιό είναι μεταξύ τους εναλλάξ ισοδύναμα. Ως εκ τούτου, οι κυλινδρικές ενδοεπιφάνειες είναι έντονα ισοσταθμισμένες. Επομένως, στον ιδανικό ΑΣ φλοιό τα πλήθη των ικανοποιημένων και μη ικανοποιημένων δεσμών της ενδοεπιφάνειας είναι περίπου ίσα, αφού διαφοροποιήσεις λαμβάνουν χώρα μόνο στα άκρα τους. Η πιθανότητα αντιστροφής λόγω θερμικής διέγερσης, των ικανοποιημένων και μη ικανοποιημένων δεσμών δεν είναι ίση, σύμφωνα με τον νόμο του Arrhenius ( $P \sim \exp(-dE/k_B T)$ ). Συγκεκριμένα, η πιθανότητα αντιστροφής είναι μεγαλύτερη για τους μη ικανοποιημένους δεσμούς, που δρουν ως κέντρα πυρήνωσης και καθορίζουν τη μαγνητική συμπεριφορά οδηγώντας στην παρατηρηθείσα ελάττωση του συνεκτικού πεδίου συγκριτικά με το ΣΔ σύστημα. Επίσης, η πρακτικά ισοσταθμισμένη ενδοεπιφάνεια των κυλινδρικών νανοσυρμάτων δικαιολογεί τις χαμηλές τιμές του  $H_{eb}$  που παρατηρούνται, καθώς το ΦΠΑ εξαρτάται άμεσα από την παρουσία των μη ισοσταθμισμένων μαγνητικών ροπών [28, 29]. Οι χαμηλές τιμές του πεδίου  $H_{eb}$  παρατηρούνται κυρίως στα ιδανικά νανοσύρματα που αναπτύσσονται κατά μήκος του άξονα [001], ενώ αντίθετα τα συστήματα με τραχεία ενδοεπιφάνεια ή τα συστήματα που αναπτύσσονται κατά μήκος του άξονα [011] εμφανίζουν σημαντικό αριθμό μη ισοσταθμισμένων μαγνητικών ροπών (Π. 3.1).

Η τραχύτητα αυξάνει τον αριθμό των μη ισοσταθμισμένων μαγνητικών ροπών με ένα στατιστικό τρόπο, ενώ στην δεύτερη περίπτωση η ανάπτυξη του νανοσύρματος κατά μήκος της διεύθυνσης [011] δημιουργεί μια μη ισοσταθμισμένη ενδοε-

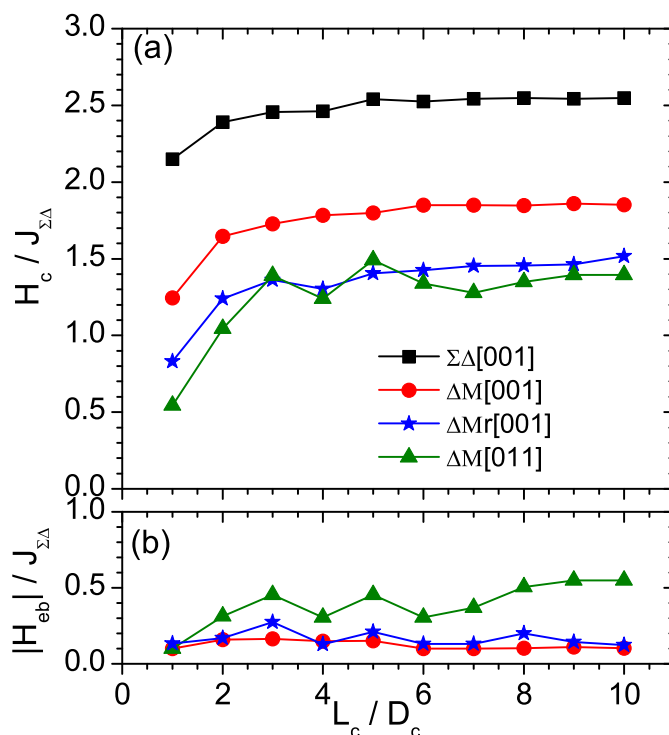


Σχήμα 3.2: Ισόθερμοι ( $T = 0.01 J_{\Sigma\Delta} / k_B$ ) βρόχοι υστέρησης της ολικής μαγνήτισης για σιδηρομαγνητικό και διμαγνητικά νανοσύρματα διαφορετικής ενδοεπιφανειακής αταξίας. Σε όλες τις περιπτώσεις, η σιδηρομαγνητική περιοχή έχει  $R_c = 5a$  και  $L_c = 50a$  και το πάχος του φλοιού είναι  $t_{sh} = 3a$ . (Μαύρα) τετράγωνα :  $\Sigma\Delta[001]$ , (κόκκινοι) κύκλοι  $\Delta M[001]$ , (μπλε) αστέρια :  $\Delta M[001]$ -τραχ και (πράσινα) τρίγωνα:  $\Delta M[011]$  νανοσύρματα [55, 56, 57, 58, 59].

πιφάνεια, καθώς διαδοχικές αντισιδηρομαγνητικές θέσεις κατά μήκος του μεγάλου άξονα του κυλίνδρου ανήκουν στο ίδιο αντισιδηρομαγνητικό υπόπλεγμα (Σχ. 3.1).

Παρά την ομοιότητα του αποτελέσματος των δυο δομικών παραγόντων, οδηγούν τελικά σε διακριτά χαρακτηριστικά στο γενικό σχήμα του βρόχου υστέρησης. Η ενδοεπιφανειακή τραχύτητα οδηγεί σε καθαρή συρρίκνωση του βρόχου υστέρησης που δεν παρατηρείται στην περίπτωση του σύρματος με άξονα χαμηλότερης συμμετρίας [55, 56, 57, 58, 59]. Η παρατηρηθείσα συρρίκνωση του βρόχου είναι το αποτέλεσμα του μέσου όρου μιας συλλογής νανοσυρμάτων με διαφορετική ενδοεπιφανειακή αταξία, που προκύπτει με πιθανοκρατικό τρόπο και χαρακτηρίζεται από διασπορά συνεκτικών πεδίων. Η συρρίκνωση έχει παρατηρηθεί και σε αντίστοιχες μελέτες διμαγνητικών νανοσωματιδίων με τραχείες ενδοεπιφάνειες [97, 98].

Τα χαρακτηριστικά πεδία  $H_c$  και  $H_{eb}$  αναμένεται, λόγω αύξησης της ανισοτροπίας σχήματος με το μήκος  $L$ , να δείχνουν εξάρτηση από το μήκος των κυλινδρικών νανοδομών (Σχ. 3.3). Για το  $\Sigma\Delta[001]$  νανόσυρμα, το πεδίο  $H_c$  δείχνει αρχικά μια αύξηση με το μήκος που τελικά καταλήγει στην τιμή κορεσμού όταν  $L_c/D_c \approx 4$ . Αυτό το αποτέλεσμα είναι σε ποιοτική συμφωνία με πρόσφατες μετρήσεις σε επιμήκη νανοσωματίδια, όπου το συνεκτικό πεδίο κορεσμού βρέθηκε προσεγγιστικά



Σχήμα 3.3: Εξάρτηση του (a) συνεκτικού πεδίου  $H_c J_{\Sigma\Delta}$  και (b) πεδίου πόλωσης-ανταλλαγής  $H_{eb} J_{\Sigma\Delta}$  από την παράμετρο αναλογίας μήκος / διάμετρος  $L_c/D_c$  νανοσυρμάτων με σταθερή ακτίνα πυρήνα  $R_c = 5a$  και πάχος φλοιού  $t_{sh} = 3a$ . Θερμοκρασία  $T = 0.01J_{\Sigma\Delta}/k_B$  [55, 56, 57, 58, 59].

στην ίδια τιμή του λόγου  $L/D$  [102].

Η ίδια εξάρτηση του πεδίου  $H_c$  από το μήκος του νανοσύρματος παρατηρείται και στα διμαγνητικά συστήματα. Η τιμή κορεσμού του συνεκτικού πεδίου  $H_c$  είναι μικρότερη εξαιτίας της σύζευξης ανταλλαγής με τον αντισιδηρομαγνητικό φλοιό. Τα οξειδωμένα νανοσύρματα με ενδοεπιφανειακή τραχύτητα ( $\Delta Mr[001]$ ) ή με άξονα χαμηλής συμμετρίας ( $\Delta M[011]$ ) παρουσιάζουν μεγαλύτερη ελάττωση του πεδίου  $H_c$ . Αυτό το φαινόμενο αναδεικνύει ένα μηχανισμό ελάττωσης που προέρχεται από την παρουσία των μη ισοσταθμισμένων ροπών [55, 56, 57, 58, 59]. Οι λεπτομέρειες του φαινομένου αυτού θα αναφερθούν στη συνέχεια. Από την άλλη μεριά, το πεδίο  $H_{eb}$  είναι ασθενώς εξαρτημένο από το μήκος του κυλίνδρου (Σχ. 3.3), καθώς το ΦΠΑ είναι επιφανειακό φαινόμενο και εξαρτάται από τον λόγο επιφάνεια / όγκος της νανοδομής. Στα κυλινδρικά σύρματα αυτός ο λόγος είναι αντιστρόφως ανάλογος με την ακτίνα του πυρήνα και επομένως ανεξάρτητος του μήκους του κυλίνδρου ( $H_{eb} \sim \frac{S}{V} = \frac{1}{R_{\Sigma\Delta}}$ ).

Σαν τελικό σχόλιο, συγκρίνονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης για τους

Πίνακας 3.2: Χαρακτηριστικά πεδία των νανοσυρμάτων με  $L_c/D_c = 9$  και  $t_{sh} = 3a$  (διμαγνητικά συστήματα) [55, 56, 57, 58, 59].

System	$H_c$	$H_{eb}$	$H_c/H_{c,\Sigma\Delta}$	$H_{eb}/H_c$
$\Sigma\Delta[001]$	2.54	0.00	1.00	0.00
$\Delta M[001]$	1.86	0.11	0.73	0.06
$\Delta Mr[001]$	1.46	0.14	0.57	0.10
$\Delta M[011]$	1.39	0.55	0.55	0.40
Co/CoO <sup>(1)</sup>	-	-	0.55	0.20

(<sup>1</sup>) Πειραματικά δεδομένα από [73]

χαμηλής θερμοκρασίας βρόχους υστέρησης με τα πειραματικά αποτελέσματα των Maurer et al [73] για νανοςύρματα Co και Co/CoO.

Η μεγάλη συρρίκνωση του πεδίου  $H_c$  που υπολογίστηκε και το ασθενές πεδίο πόλωσης ανταλλαγής έχουν παρατηρηθεί και πειραματικά [73]. Καθώς μια απευθείας σύγκριση των υπολογισμένων τιμών των πεδίων  $H_c$  και  $H_{eb}$  και των πειραματικών τιμών δεν είναι εφικτή στα πλαίσια του αριθμητικού μοντέλου (δεν μπορεί να γίνει σύγκριση των χρόνων μέτρησης), η μελέτη περιορίζεται σε σύγκριση χαρακτηριστικών λόγων. Συγκεκριμένα, πραγματοποιείται εκτίμηση της ελάττωσης του συνεκτικού πεδίου εξαιτίας της ενδοεπιφανειακής σύζευξης ανταλλαγής από τον λόγο  $H_c/H_{c,\Sigma\Delta}$  και αντίστοιχα για το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής από τον λόγο  $H_{eb}/H_c$ . Στον Π. 3.2 συνοψίζονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης για νανοςύρματα με διαστάσεις αντίστοιχες με εκείνες των πειραματικών μελετών [73]. Όπως φαίνεται εκεί, όταν μια μη ισοσταθμισμένη ενδοεπιφάνεια περιλαμβάνεται στο μοντέλο, είτε λόγω ενδοεπιφανειακής τραχύτητας είτε λόγω χαμηλής συμμετρίας, τα αριθμητικά αποτελέσματα είναι σε καλή συμφωνία με τα πειραματικά. Αυτό είναι λογικό, καθώς τόσο η ενδοεπιφανειακή τραχύτητα όσο και η έλλειψη προσανατολισμού των ροπών του πυρήνα και του φλοιού είναι σύμφυτες με τις χημικές μεθόδους κατασκευής των νανοσυρμάτων.

### Μηχανισμός αντιστροφής της Μαγνήτισης

Στη συνέχεια, πραγματοποιείται μελέτη του μηχανισμού αντιστροφής της Μαγνήτισης του αμιγώς σιδηρομαγνητικού και των διμαγνητικών νανοσυρμάτων και τονίζονται οι διαφορές που εισάγει η μορφολογία πυρήνα-φλοιού.

Είναι γνωστό πως σε σιδηρομαγνητικές νανοδομές με τις τρεις διαστάσεις κάτω από το όριο του μήκους ανταλλαγής, όπως τα σφαιρικά και επιμήκη νανοσωματίδια, η αντιστροφή της μαγνήτισης πραγματοποιείται μέσω σύμφωνης στροφής των μαγνητικών ροπών [103]. Αντίθετα, σε σιδηρομαγνητικά νανοσύρματα που χαρακτηρίζονται από μεγάλο λόγο μήκος / ακτίνα, η αντιστροφή της μαγνήτισης πραγματοποιείται μέσω της διάδοσης και της συγχώνευσης ενός ζεύγους μαγνητικών τοιχωμάτων που σχηματίζονται στα δυο ελεύθερα άκρα του νανοσύρματος [47, 49, 104]. Η μετάβαση από την σύμφωνη στροφή των επιμηκών νανοσωματιδίων στο σχηματισμό και τη διάδοση των μαγνητικών τοιχωμάτων σε μακριά σύρματα αντικατοπτρίζεται μακροσκοπικά στην αύξηση της τιμής του πεδίου  $H_c$  ως προς τον λόγο μήκος / ακτίνα (Σχ. 3.3). Ο κορεσμός του συνεκτικού πεδίου καταδεικνύει την εγκαθίδρυση των μαγνητικών τοιχωμάτων ως μηχανισμό αντιστροφής. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα του Σχ. 3.3, η διάδοση των μαγνητικών τοιχωμάτων παρατηρείται σε νανοσύρματα όπου  $L_c/D_c > 4$ . Επομένως, στο υπόλοιπο αυτής της μελέτης, θα μελετηθούν νανοσύρματα με λόγο  $L_c/D_c = 5$ .

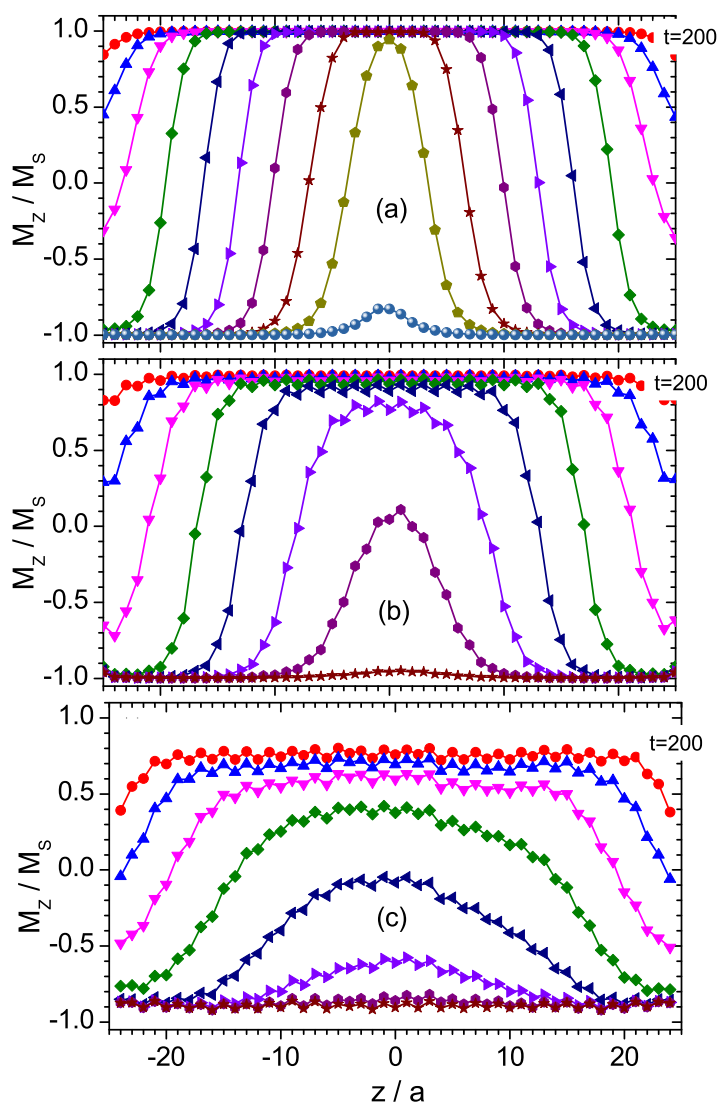
Για τη μελέτη της αντιστροφής της μαγνήτισης, η προσομοίωση ξεκινάει με τα σύρματα στην κατάσταση ψύξης υπό πεδίο, έτσι ώστε να έχει επέλθει η μαγνητική τάξη. Στη συνέχεια, εφαρμόζεται πεδίο αντιστροφής και καταγράφεται η χρονική εξέλιξη του προφίλ της μαγνήτισης  $M_z(z)$ , δηλαδή διαφορετικά χρονικά στιγμιότυπα της παράλληλης στο εξωτερικό πεδίο μαγνήτισης ανά "ατομικό" επίπεδο,

$$M_z(z) = \sum_{i \in \Sigma\Delta} m_{i,z} \cdot \delta(z_i - z) / \sum_{i \in \Sigma\Delta} \delta(z_i - z).$$

Αποτελέσματα για την χρονική εξέλιξη του προφίλ της μαγνήτισης απεικονίζονται στις εικόνες Σχ. 3.4 και Σχ. 3.5, όπου φαίνονται τα τρία στάδια του μηχανισμού αντιστροφής της μαγνήτισης (πυρήνωση-διάδοση-καταστροφή).

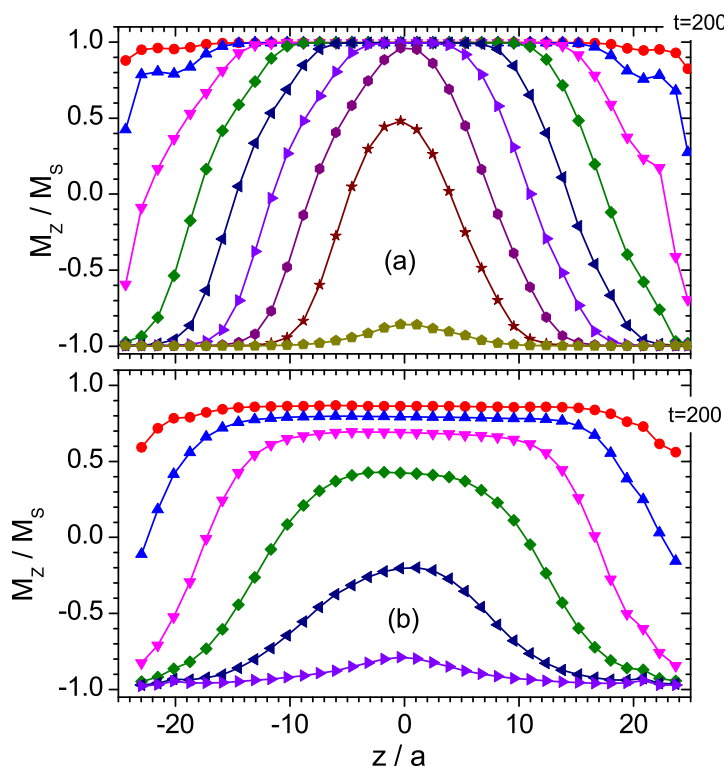
Εξετάζοντας την εντός του επιπέδου κατανομή της μαγνήτισης στην περιοχή των τοιχωμάτων διαπιστώνεται πως σε όλες τις περιπτώσεις που μελετώνται, τα νανοσύρματα υποστηρίζουν εγκάρσια τοιχώματα [49, 50]. Αυτή η παρατήρηση ελέγχθηκε υπολογίζοντας το στροβιλισμό της μαγνήτισης  $m_v$  (Εξ.1.72), που καταγράφει το βαθμό της περιστροφής της. Οι υπολογισμοί δείχνουν ότι  $m_v \approx 0$  σε όλα τα χρονικά βήματα κατά τη διάρκεια της αντιστροφής. Επομένως, η συνιστώσα  $M_z(z)$  περιέχει όλη την πληροφορία για τη δυναμική των μαγνητικών τοιχωμάτων.

Η παρουσία του ΑΣ φλοιού διαμορφώνει τα μαγνητικά τοιχώματα στο  $\Sigma\Delta$  πυρήνα [55, 56, 57, 58, 59]. Αρχικά, το πλάτος του μαγνητικού τοιχώματος αυξάνεται



Σχήμα 3.4: Χρονική εξέλιξη του προφίλ της μαγνήτισης ( $M_z/M_s$  συναρτήσει της θέσης  $z/a$ ) υπό την επίδραση εξωτερικού αντιστρέφοντος πεδίου  $H = -0.5J_{\Sigma\Delta}$ . Τα στιγμιότυπα απεικονίζονται κάθε  $\Delta t=200$  MCSS ξεκινώντας από την στιγμή  $t_0=200$  MCSS (ανώτερη καμπύλη). (a)  $\Sigma\Delta[001]$  νανόσυρμα, (b)  $\Delta M[001]$  νανόσυρμα, και (c)  $\Delta M\Gamma[001]$  νανόσυρμα. Παράμετροι  $R_c = 5a$ ,  $t_{sh} = 3a$ ,  $L_c = 50a$  και  $T = 0.01J_{\Sigma\Delta}$  [55, 56, 57, 58, 59].

ελαφρώς ( $\delta_{\Sigma\Delta} \approx 7a$  και  $\delta_{\Delta M} \approx 10a$ ), όπως φαίνεται και στο σχήμα Σχ. 3.4. Το πλάτος του μαγνητικού τοιχώματος καθορίζεται από τον ανταγωνισμό μεταξύ αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής και ενεργούς ανισοτροπίας, η οποία περιλαμβάνει και την συνεισφορά της ανισοτροπίας σχήματος [104],  $\delta = \pi\sqrt{A/(K + \pi M_s^2)}$ . Στη διακριτοποιημένη περιγραφή, η ανάλογη έκφραση είναι,  $\delta = a\pi\sqrt{J/(K + \lambda g\langle m_z \rangle^2)}$ ,



Σχήμα 3.5: Χρονική εξέλιξη των μαγνητικών προφίλ ( $M_z/M_s$  συναρτήσει της θέσης  $z/a$ ) κατά την ανταπόκριση του συστήματος σε πεδίο αντιστροφής  $H = -0.5J_{\Sigma\Delta}$ . Τα στιγμιότυπα καταγράφονται κάθε  $\Delta t=200$  MCSS ξεκινώντας από την στιγμή  $t_0=200$  MCSS (πάνω καμπύλη). (a)  $\Sigma\Delta[011]$  νανόσυρμα, και (b)  $\Delta M[011]$  νανόσυρμα. Παράμετροι  $R_c = 5a$ ,  $t_{sh} = 3a$ ,  $L_c = 50a$  και  $T = 0.01J_{\Sigma\Delta}$  [55, 56, 57, 58, 59].

όπου  $\langle m_z \rangle$  είναι η ολική μαγνήτιση (μέση μαγνητική ροπή) του σύνθετου νανοσύρματος και  $\lambda$  μία γεωμετρική σταθερά.

Όπως φαίνεται στο σχήμα Σχ. 3.2 η ολική μαγνήτιση του διμαγνητικού νανοσύρματος είναι μικρότερη από εκείνη του σιδηρομαγνητικού. Το γεγονός αυτό εξηγεί την αύξηση του πλάτους του μαγνητικού τοιχώματος. Είναι ενδιαφέρον ότι στα διμαγνητικά συστήματα παρατηρείται μία σχεδόν ομοιόμορφη ελάττωση της μαγνήτισης ενδιαμέσως των δυο μαγνητικών τοιχωμάτων. Το φαινόμενο είναι εντονότερο στις περιπτώσεις των μη ισοσταθμισμένων ενδοεπιφανειών (Σχ. 3.4c, Σχ. 3.5). Καθώς αυτή η ελάττωση παρατηρείται μακριά από την περιοχή των μαγνητικών τοιχωμάτων, εκλαμβάνεται ως ένας δευτερεύων μηχανισμός αντιστροφής [55, 56, 57, 58, 59]. Το γεγονός ότι το προφίλ της μαγνήτισης μεταξύ των μαγνητικών τοιχωμάτων παραμένει ομοιόμορφο καθώς οι τιμές ελαττώνονται, καταδεικνύει μια



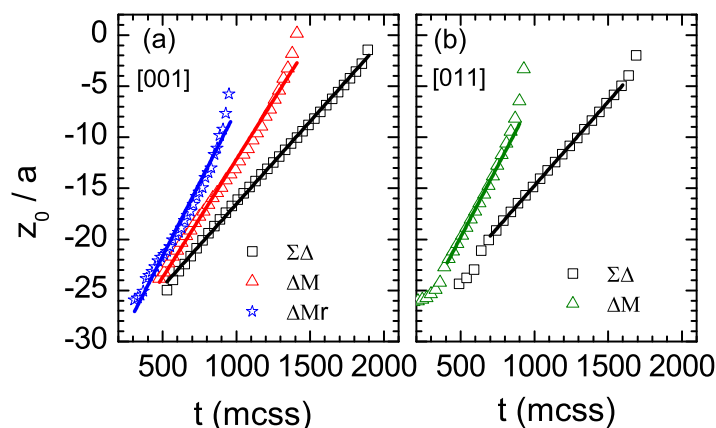
σύμφωνη στροφή των ροπών. Επίσης, το γεγονός πως το φαινόμενο παρατηρείται μόνο σε διμαγνητικά νανοσύρματα φανερώνει ότι αυτός ο μηχανισμός σχετίζεται με την παρουσία του ενδοεπιφανειακού στρώματος του φλοιού. Όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη υπο-ενότητα οι μη ικανοποιημένοι δεσμοί του αντισιδερομαγνητικού φλοιού λειτουργούν ως κέντρα πυρήνωσης που ενισχύουν την αντιστροφή της μαγνήτισης. Το ίδιο φαινόμενο παρατηρείται και στην παρούσα μικροσκοπική μελέτη. Συγκεκριμένα, στο προφίλ του συστήματος με ιδανικό φλοιό (Σχ. 3.4b) παρατηρείται "οδοντωτός" σχηματισμός της μαγνήτισης ανά "ατομικό" επίπεδο που υποδηλώνει και την διαφορετική τάση διαδοχικών ροπών για αντιστροφή ανάλογα με το δεσμό που σχηματίζουν με τις γειτονικές τους αντισιδερομαγνητικές ροπές. Το φαινόμενο είναι εντονότερο στα συστήματα με τραχύτητα σε συμφωνία με τα μακροσκοπικά αποτελέσματα των βρόχων υστέρησης των συστημάτων αυτών. Αυτό συμβαίνει καθώς στα συστήματα αυτά αυξάνεται ο αριθμός των μη ικανοποιημένων δεσμών που σχηματίζονται στην κατάσταση ψύξης υπό πεδίο. Το φαινόμενο είναι εύκολα διακριτό και από το σχήμα Σχ. 3.1c, όπου όλοι οι δεσμοί στην ενδοεπιφάνεια είναι μη ικανοποιημένοι. Η ενδοεπιφανειακή ροπή του φλοιού στο διμαγνητικό σύστημα  $\Delta M[011]$  στην κατάσταση ψύξης υπό πεδίο, είναι μεγάλη και θετική ( $M_{shif} \approx 0.4$ ), ενώ είναι παράλληλη στη μαγνήτιση του πυρήνα ανεξάρτητα από τον ΑΣ χαρακτήρα της ενδοεπιφανειακής σύζευξης ανταλλαγής ( $J_{int} < 0$ ). Σε ένα παρόμοιο συμπέρασμα σχετικά με τον ρόλο των ΑΣ ενδοεπιφανειακών ροπών σε νανοσύρματα Co/CoO κατέληξαν οι Maurer *et al* [73], που ισχυρίστηκαν πως οι παγωμένες ροπές των ΑΣ κόκκων στο φλοιό λειτουργούν ως κέντρα πυρήνωσης που ενισχύουν την αντιστροφή της μαγνήτισης του πυρήνα. Στο μοντέλο μας, οι μη ικανοποιημένοι δεσμοί είναι ομοιόμορφα διασκορπισμένοι στην επιφάνεια του πυρήνα. Κατά συνέπεια, δρουν συλλογικά και η παρατηρούμενη πυρήνωση παίρνει τη μορφή μιας σύμφωνης διαδικασίας στο κεντρικό τμήμα του σύρματος.

Στη συνέχεια, υπολογίζονται τα χαρακτηριστικά μεγέθη της δυναμικής των μαγνητικών τοιχωμάτων, ταχύτητα και ευκινησία διάδοσης, κατά την ανταπόκριση των συρμάτων σε πεδίο αντιστροφής. Στην περιοχή πεδίων που πραγματοποιείται η μελέτη, η ταχύτητα διάδοσης είναι γραμμική με το εξωτερικό πεδίο [82, 103],

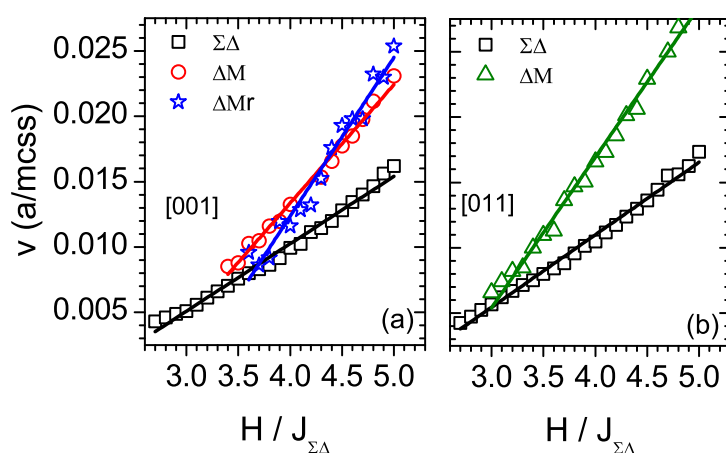
$$v(H) = \mu \cdot (H - H_o) \quad (3.5)$$

όπου  $\mu$  είναι η ανεξάρτητη από το πεδίο ευκινησία,  $H_o$  είναι το μέτρο του αριστερού συνεκτικού πεδίου (Σχ. 3.2) και οι τιμές του πεδίου είναι  $H > H_o$ .

Η ταχύτητα των τοιχωμάτων  $v(H)$  υπολογίζεται μέσω της γραμμικής προσαρ-



Σχήμα 3.6: Χρονική εξέλιξη της θέσης  $z_0/a$  του κέντρου των μαγνητικών τοιχωμάτων. (a)  $\Sigma\Delta$ ,  $\Delta M$  και  $\Delta Mr$  νανοςύρματα ([001]) (b)  $\Sigma\Delta$  και  $\Delta M$  νανοςύρματα ([011])  $R_c = 5a, t_{sh} = 3a, L_c = 50a, H = -0.5J_{\Sigma\Delta}$  και  $T = 0.01J_{\Sigma\Delta}$ . [55, 56, 57, 58, 59].



Σχήμα 3.7: Εξάρτηση της ταχύτητας διάδοσης  $v$  των μαγνητικών τοιχωμάτων από το εξωτερικό πεδίο  $H/J_{\Sigma\Delta}$ . (a)  $\Sigma\Delta$ ,  $\Delta M$  και  $\Delta Mr$  νανοςύρματα ([001]). (b)  $\Sigma\Delta$  και  $\Delta M$  νανοςύρματα ([011]).  $R_c = 5a, t_{sh} = 3a, L_c = 50a$  και  $T = 0.01J_{\Sigma\Delta}$ . Οι ευθείες είναι η γραμμική συσχέτιση των δεδομένων. [55, 56, 57, 58, 59].

μογής στην χρονική εξέλιξη της θέσης του κέντρου των μαγνητικών τοιχωμάτων,  $z_o$ , που προσδιορίζεται ως το σημείο που ικανοποιεί τη σχέση  $M_z(z_o) = 0$  στα σχήματα Σχ. 3.4 και Σχ. 3.5 (Παράρτημα / Α'.2). Τυπικά αποτελέσματα για την μετατόπιση των τοιχωμάτων απεικονίζονται στο σχήμα Σχ. 3.6. Οι αποκλίσεις από την γραμμικότητα στη μετατόπιση των τοιχωμάτων που φαίνονται στα τελευταία

Πίνακας 3.3: Χαρακτηριστικά μαγνητικών τοιχωμάτων νανοσυρμάτων με  $R_c = 5a, t_{sh} = 3a$  και  $L_c = 50a$  σε θερμοκρασία  $T = 0.01J_{\Sigma\Delta}$  [55, 56, 57, 58, 59].

Σύστημα	$v^{(1)}$	$\mu^{(2)}$	$H_{eb}$
$\Sigma\Delta[001]$	0.016	0.006	-
$\Delta M[001]$	0.021	0.009	0.15
$\Delta M\Gamma[001]$	0.028	0.012	0.20
$\Sigma\Delta[011]$	0.017	0.006	-
$\Delta M[011]$	0.25	0.012	0.21

(1) Τιμές ταχύτητας υπολογισμένες σε πεδίο  $H = -0.5J_{\Sigma\Delta}$  (μονάδα μέτρησης είναι η  $a/mcss$ )

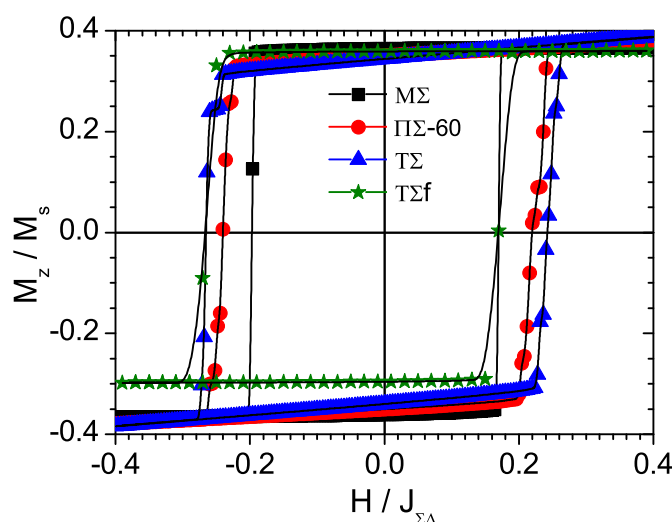
(2) Η μονάδα μέτρησης της ευκινησίας είναι  $a/(mcss \cdot J_{\Sigma\Delta})$

βήματα (Σχ. 3.6), σηματοδοτούν την έναρξη της συγχώνευσης των μαγνητικών τοιχωμάτων. Το φαινόμενο είναι περισσότερο αισθητό στα διμαγνητικά συστήματα καθώς τα πλάτη των τοιχωμάτων είναι ακόμα μεγαλύτερα. Η ταχύτητα των τοιχωμάτων σε ένα συγκεκριμένο πεδίο, Εξ. (3.5), εξαρτάται τόσο από το εξωτερικό πεδίο όσο και από τις φυσικές ιδιότητες του συστήματος. Η εξάρτηση της μαγνήτισης μόνο από τα φυσικά χαρακτηριστικά ( $M_s, A, K_u$ ) αντικατοπτρίζεται στην παράμετρο της ευκινησίας. Η ευκινησία  $\mu$  υπολογίζεται μέσω γραμμικής προσαρμογής στην εξαρτημένη από το πεδίο ταχύτητα, όπως φαίνεται στο σχήμα Σχ. 3.7. Οι ταχύτητες και οι ευκινησίες των μαγνητικών τοιχωμάτων για τα συστήματα που μελετώνται συνοψίζονται στον πίνακα Π. 3.3. Τα αποτελέσματα δείχνουν αύξηση της ευκινησίας των μαγνητικών τοιχωμάτων, εξαιτίας του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού. Επιπρόσθετη αύξηση στην ευκινησία παρατηρείται όταν ο βαθμός μη ισοστάθμισης αυξάνεται, κάτι που επιτυγχάνεται είτε εισάγοντας ενδοεπιφανειακή τραχύτητα ( $\Delta M\Gamma[001]$ ) είτε αλλάζοντας την κρυσταλλογραφική διεύθυνση της  $\Sigma\Delta$  -  $A\Sigma$  ενδοεπιφάνειας ( $\Delta M[011]$ ). Επομένως, οι μη ισοσταθμισμένες ενδοεπιφανειακές μαγνητικές ροπές των συστημάτων  $\Delta M\Gamma[001]$  και  $\Delta M[011]$  ενισχύουν το μηχανισμό σύμφωνης στροφής, που παρατηρήθηκε στο κεντρικό τμήμα των συρμάτων και διευκολύνει την διάδοση του ζεύγους των τοιχωμάτων [55, 56, 57, 58, 59].

### 3.3.2 Επίδραση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού

Στην ενότητα αυτή θα μελετήσουμε την επίδραση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού στις μαγνητικές ιδιότητες των διμαγνητικών νανοσυρμάτων. Στην εικόνα Σχ. 3.1d, απεικονίζεται μια χαρακτηριστική περίπτωση διμαγνητικού νανοσύρματος με πολυκρυσταλλικό φλοιό που αποτελείται από  $N_g = 60$  κρυσταλλίτες.

#### Ισόθερμοι βρόχοι υστέρησης



Σχήμα 3.8: Ισόθερμοι βρόχοι υστέρησης διμαγνητικών νανοσυρμάτων ίδιου μεγέθους και διαφορετικού βαθμού πολυκρυσταλλικότητας. Τετράγωνα (μαύρο): μονοκρυσταλλικός φλοιός ( $N_g = 1$ ). Κύκλοι (κόκκινο): πολυκρυσταλλικός φλοιός ( $N_g = 60$ ). Τρίγωνα (μπλε): τυχαίος φλοιός ( $N_g = 7098$ ). Αστέρια (πράσινο): τυχαίος "παγωμένος" φλοιός. Οι παράμετροι όπως στον πίνακα Π. 3.4 [91, 92, 93, 94, 95].

Αρχικά μελετάται η μακροσκοπική μαγνητική συμπεριφορά των νανοσυρμάτων, υπολογίζοντας τους χαμηλής θερμοκρασίας βρόχους υστέρησης και τα χαρακτηριστικά τους πεδία, δηλαδή το συνεκτικό πεδίο ( $H_c$ ) και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής ( $H_{eb}$ ). Το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο εφαρμόζεται παράλληλα στον άξονα του κυλίνδρου (z-άξονας). Θεωρούμε διαφορετικά μοντέλα περιγραφής για τον αντισιδηρομαγνητικό φλοιό, όπως φαίνεται στον πίνακα Π. 3.4.

Στην περίπτωση του  $\Delta M[001]$  ολόκληρος ο φλοιός αποτελεί πρακτικά έναν κρυσταλλίτη ( $N_g = 1$ ). Ο σιδηρομαγνητικός πυρήνας, δηλαδή, περιβάλλεται από μονοκρυσταλλικό φλοιό. Από εδώ και στο εξής θα αναφερόμαστε στο συγκεκριμένο σύστημα ως μονοκρυσταλλικό σύστημα (ΜΣ). Στην άλλη ακραία περίπτωση

του φλοιού με εντελώς τυχαία κατανεμημένους άξονες εύκολες μαγνήτισης (ΤΣ) κάθε κρυσταλλίτης περιέχει ένα μόνο κόκκο ( $N_g = 7098$ ). Στην ενδιάμεση κατάσταση του πολυκρυσταλλικού φλοιού (ΠΣ-60), ο φλοιός αποτελείται από ( $N_g = 60$ ) κρυσταλλίτες. Προφανώς, το μέγεθος των κρυσταλλιτών του φλοιού μεγιστοποιείται στην περίπτωση του μονοκρυσταλλικού συστήματος και ελαχιστοποιείται στο σύστημα με τον "τυχαίο" φλοιό.

Στο Σχ. 3.8 συγκρίνουμε τους βρόχους νανοσυρμάτων του ίδιου μήκους, διαμέτρου, και πάχους φλοιού, αλλά με διαφορετικό βαθμό πολυκρυσταλλικότητας φλοιού. Επίσης, συμπεριλαμβάνουμε και τον βρόχο του ΤΣ διατηρώντας όμως τον φλοιό ακίνητο κατά τον σχηματισμό του ( $f$ ). Μια εμφανής οριζόντια μετατόπιση των βρόχων παρατηρείται σε όλα τα δείγματα ως αποτέλεσμα του ΦΠΑ. Ένα γενικό χαρακτηριστικό είναι η σταδιακή διάτμηση του βρόχου καθώς ελαττώνεται το μέγεθος των κρυσταλλιτών. Το φαινόμενο συνδέεται με το γεγονός πως στα συστήματα υψηλού βαθμού πολυκρυσταλλικότητας υπάρχει μια ευρεία διασπορά των ενεργειακών φραγμών με τους οποίους έρχονται αντιμέτωπες οι σιδηρομαγνητικές ροπές της ενδοεπιφάνειας κατά την αντιστροφή. Επομένως, ο βρόχος στα πολυκρυσταλλικά συστήματα παύει να είναι τετράγωνος όπως στο μονοκρυσταλλικό σύστημα [91, 92, 93, 94, 95]. Ακόμα, γίνεται εύκολα αντιληπτό με απλή παρατήρηση του σχήματος Σχ. 3.8, ότι οι βρόχοι πλαταίνουν και η μετατόπισή τους ελαττώνεται καθώς μικραίνει το μέγεθος των κρυσταλλιτών. Το φαινόμενο αυτό υποδεικνύει αύξηση του συνεκτικού πεδίου ( $H_c$ ) και ελάττωση του πεδίου πόλωσης ( $H_{cb}$ ) ανταλλαγής σε συστήματα μικρών κρυσταλλιτών [91, 92, 93, 94, 95]. Τα αποτελέσματα για τα πεδία  $H_c$  και  $H_{cb}$  των συστημάτων με διαφορετικά δομικά χαρακτηριστικά απεικονίζονται στον πίνακα Π. 3.4.

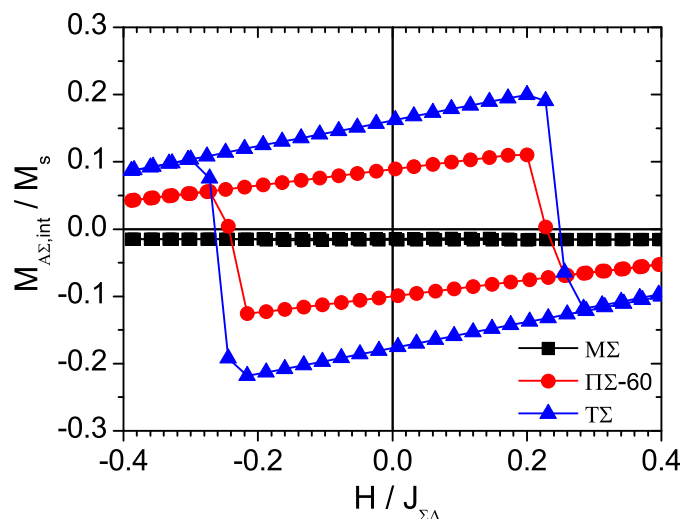
Η φυσική προέλευση της παρατηρούμενης εξάρτησης των  $H_c$  και  $H_{cb}$  από το πλάτος των κρυσταλλιτών μπορεί να αποδοθεί σε δυο διακριτούς φυσικούς παράγοντες, την ανταπόκριση του ενδοεπιφανειακού στρώματος του φλοιού ( $M_{A\Sigma,int}$ ) στο εξωτερικό πεδίο κατά την αντιστροφή αλλά και την μαγνητική δομή του συστήματος στην κατάσταση ψύξης υπό πεδίο [91, 92, 93, 94, 95]. Για να γίνει αυτό το σημείο πιο κατανοητό, απεικονίζεται στο Σχ. 3.9 η μαγνήτιση του ενδοεπιφανειακού στρώματος του φλοιού κατά την αντιστροφή του εξωτερικού πεδίου για το σχηματισμό του βρόχου υστέρησης. Η παρατηρηθείσα διαπλάτυνση του βρόχου με την ελάττωση του πλάτους των κρυσταλλιτών φανερώνει πως οι ενδοεπιφανειακές ροπές του φλοιού παρασύρονται κατά την αντιστροφή (φαινόμενο συρμού, drag effect) από τις ροπές του πυρήνα, εξαιτίας των μεταξύ τους αλληλεπιδρά-

Πίνακας 3.4: Δομικές παράμετροι και αποτελέσματα για διμαγνητικά νανοσύρματα με  $R_c = 5a$ ,  $L_c = 50a$  and  $t_{sh} = 3a$  [91, 92, 93, 94, 95].

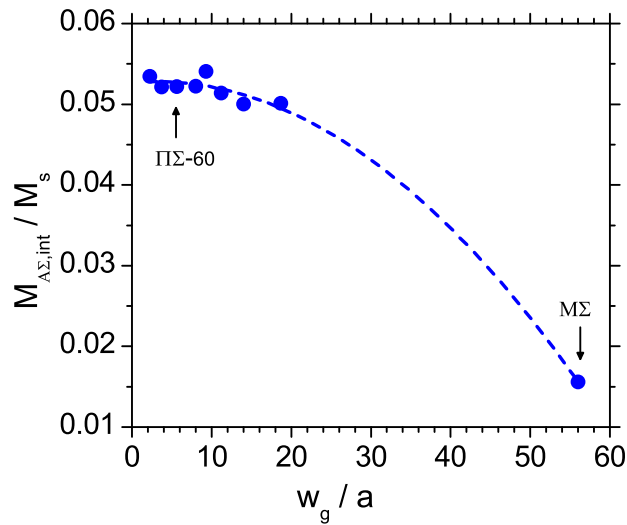
Σύστημα	$w_g/a(1)$	$H_c$	$H_{eb}$	$M_{A\Sigma,int}(2)$	$\mu(3)$
$M\Sigma^a$	56.0	1.82	-0.14	0.015	0.0140
$\Pi\Sigma - 60^b$	5.6	2.30	-0.11	0.052	0.0120
$T\Sigma^c$	1.0	2.54	-0.10	0.054	0.0085
$T\Sigma f^d$	1.0	2.18	-0.49	0.054	0.0099

- (1) μέγεθος κρυσταλλιτών του φλοιού  
 (2) Μαγνήτιση του ενδοεπιφανειακού στρώματος του φλοιού (ανά spin) στην κατάσταση ψύξης υπό πεδίο  
 (3) ευκινησία μαγνητικών τοιχωμάτων [μονάδα μέτρησης  $a / (MCSS \cdot J_{\Sigma\Delta})$ ]  
 (a) μονοκρυσταλλικός φλοιός  
 (b) πολυκρυσταλλικός φλοιός με  $N_g = 60$  κρυσταλλίτες  
 (c) πολυκρυσταλλικός φλοιός με  $N_g = 7098$  κρυσταλλίτες  
 (d) πολυκρυσταλλικός φλοιός με  $N_g = 7098$  κρυσταλλίτες με "παγωμένες" μαγνητικές ροπές κατά την αντιστροφή

σεων ανταλλαγής ( $J_{int}$ ). Το φαινόμενο γίνεται εντονότερο καθώς το μέγεθος των κρυσταλλιτών ελαττώνεται.



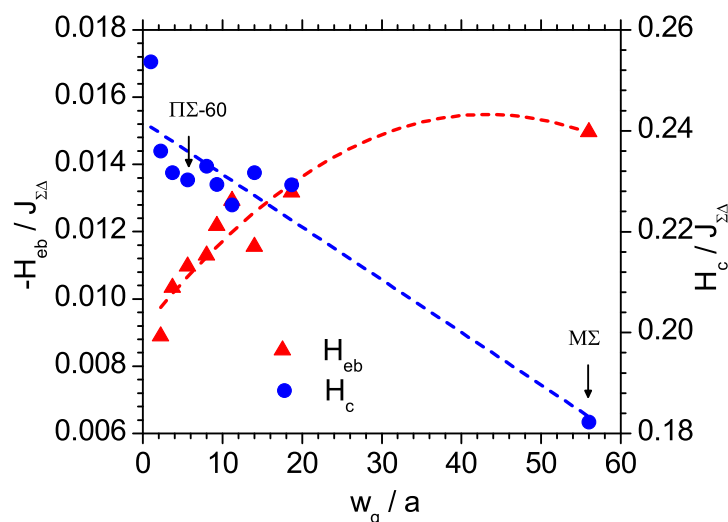
Σχήμα 3.9: Ισόθερμοι βρόχοι υστέρησης του ενδοεπιφανειακού στρώματος του φλοιού. Στα πολυκρυσταλλικά συστήματα παρατηρούνται πλήρεις βρόχοι υστέρησης λόγω του φαινομένου συρμού που προκαλείται στις αντισιδηρομαγνητικές ροπές κατά την αντιστροφή. Το φαινόμενο ενισχύεται με την αύξηση της πολυκρυσταλλικότητας. Οι δομικές παράμετροι είναι όπως στον πίνακα Π. 3.4 [91, 92, 93, 94, 95].



Σχήμα 3.10: Εξάρτηση της μαγνήτισης  $M_{A\Sigma,int}/M_s$  του ενδοεπιφανειακού στρώματος του φλοιού στην κατάσταση ψύξης υπό πεδίο από το πλάτος των κρυσταλλιτών  $w_g/a$  του φλοιού. Οι δομικές παράμετροι είναι όπως στον πίνακα Π. 3.4 [91, 92, 93, 94, 95].

Η επίδραση του φαινομένου συρμού στα πεδία  $H_c$  και  $H_{eb}$  μπορεί να απομω-  
νωθεί συγκρίνοντας τους βρόχους των συστημάτων ΤΣ και ΤΣf που έχουν πανο-  
μοιότυπες διατάξεις μαγνητικών ροπών στον φλοιό στην κατάσταση ψύξης υπό  
πεδίο (π.χ. τιμές  $M_{A\Sigma,int}$ ), με μόνη διαφορά τη διατήρηση των ροπών του τελευ-  
ταίου συστήματος ακίνητων στις αρχικές τους διευθύνσεις κατά την αντιστροφή  
του πεδίου. Όπως φαίνεται στον Π. 3.4, σε αυτά τα συστήματα το συνεκτικό πεδίο  
ελαττώνεται και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής αυξάνεται δραματικά όταν απενερ-  
γοποιείται το φαινόμενο συρμού. Επίσης, ο ρόλος της αρχικής μαγνήτισης  $M_{A\Sigma,int}$   
αποκαλύπτεται συγκρίνοντας τους βρόχους των ΜΣ και ΤΣf νανοσυρμάτων, που  
έχουν διαφορετικές αρχικές καταστάσεις μαγνήτισης (Σχ. 3.10) και "παγωμένες"  
ενδοεπιφανειακές ροπές του φλοιού. Στην περίπτωση του μοκρυσταλλικού νανο-  
σύρματος (ΜΣ), το "πάγωμα" των ροπών κατά την αντιστροφή καθορίζεται από  
την ισχυρή ανισοτροπία του ΑΣ φλοιού, όπως εύκολα διαπιστώνεται και από την  
έλλειψη απόκρισης της μαγνήτισης του φλοιού στο εξωτερικό πεδίο (Σχ. 3.9). Τα  
αποτελέσματα στον πίνακα Π. 3.4 δείχνουν ενίσχυση των τιμών  $M_{A\Sigma,int}$  για το σύ-  
στημα ΤΣf που συνοδεύεται από αύξηση τόσο του συνεκτικού πεδίου  $H_c$  όσο και  
του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής  $H_{eb}$ . Αξίζει να σημειωθεί, πως το αποτέλεσμα  
αυτό είναι σε συμφωνία με τις προβλέψεις του μοντέλου των Meiklejohn-Bean, ότι  
δηλαδή το πεδίο πόλωσης-ανταλλαγής εξαρτάται γραμμικά από τη ροπή του αντι-  
σιδηρομαγνητικού στρώματος [27]. Συνοψίζοντας, το φαινόμενο συρμού και η αρ-

χική μαγνητική δομή του συστήματος δρουν συνεργατικά και οδηγούν σε ενίσχυση του συνεκτικού πεδίου  $H_c$  ενώ λειτουργούν ανταγωνιστικά κατά την ελάττωση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής  $H_{eb}$  [91, 92, 93, 94, 95].



Σχήμα 3.11: Εξάρτηση του συνεκτικού πεδίου  $H_c/J_{\Sigma\Delta}$  και του πεδίου πόλωσης-ανταλλαγής  $H_{eb}/J_{\Sigma\Delta}$  από το πλάτος των κρυσταλλινών  $w_g / a$ . Οι δομικές παράμετροι όπως στον πίνακα Π. 3.4 [91, 92, 93, 94, 95].

Στο Σχ. 3.11 απεικονίζεται η εξάρτηση των χαρακτηριστικών πεδίων από το μέγεθος των κρυσταλλινών. Σε όλες τις περιπτώσεις η κεντρική γωνία των κρυσταλλινών παραμένει σταθερή ( $\phi \approx 60^\circ$ ) και μόνο το πλάτος τους μεταβάλλεται. Η προσέγγιση αυτή είναι κατάλληλη, καθώς τα νανοσύρματα που μελετώνται είναι λεπτά και επομένως μπορούν να υποστηρίξουν μόνο εγκάρσια τοιχώματα [55] με ομοιόμορφη εντός του επιπέδου δομή μαγνητικών ροπών. Κατά συνέπεια, η ελάττωση της γωνίας των κρυσταλλινών, που οδηγεί στην αύξηση των τιμών  $N_\phi$ , δεν τροποποιεί τα αποτελέσματά και η συμπεριφορά του συστήματος εξαρτάται μόνο από το πλάτος  $w_g$  των κρυσταλλινών.

Μια συστηματική συμπεριφορά παρατηρείται σε όλες τις περιπτώσεις, δηλαδή η ελάττωση του πλάτους των κρυσταλλινών οδηγεί σε αύξηση του συνεκτικού πεδίου  $H_c$  και σε ελάττωση του πεδίου πόλωσης-ανταλλαγής  $H_{eb}$ . Αυτή η συμπεριφορά μπορεί να κατανοηθεί στα πλαίσια του μοντέλου τυχαίας ανισοτροπίας [105], σύμφωνα με το οποίο η ελάττωση του πλάτους των κρυσταλλινών οδηγεί σε ενεργό ανισοτροπία του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού, που προκύπτει ως ο μέσος όρος πάνω σε πολλούς κρυσταλλίτες πλάτους εντός της εμβέλειας του μήκους συσχέτισης των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής και επομένως παρουσιάζεται

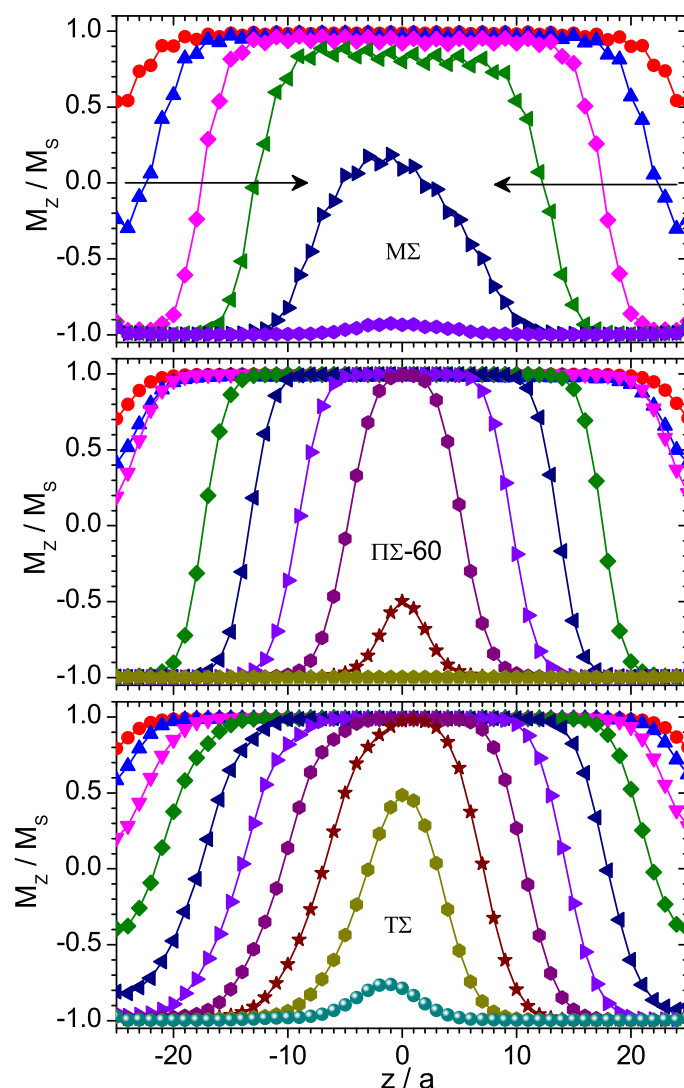


ελαττωμένη κατά απόλυτη τιμή. Η σταδιακή μαγνητική "χαλάρωση" του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού με την ελάττωση του πλάτους των κρυσταλλιτών, ενισχύει το φαινόμενο συρμού των ενδοεπιφανειακών ροπών και καθορίζει την συμπεριφορά των πεδίων  $H_c$  και  $H_{cb}$  [91, 92, 93, 94, 95].

### Μηχανισμός αντιστροφής της μαγνήτισης

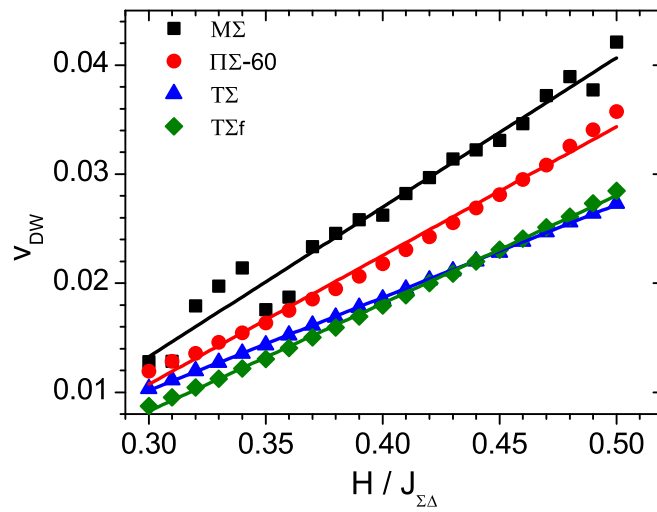
Στη συνέχεια μελετάται η επίδραση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού στη διάδοση των μαγνητικών τοιχωμάτων κατά την αντιστροφή της μαγνήτισης. Η σύζευξη ανταλλαγής με ένα αντισιδηρομαγνητικό φλοιό διαμορφώνει το μηχανισμό αντιστροφής, όπως πειραματικά [73] και αριθμητικά αποτελέσματα έχουν δείξει [73, 55]. Σε διμαγνητικά νανοσύρματα με μονοκρυσταλλικό φλοιό, οι μη ικανοποιημένοι δεσμοί της ενδοεπιφάνειας λειτουργούν ως κέντρα πυρήνωσης ενός δευτερεύοντος μηχανισμού, που δρα συνεργατικά με την διάδοση των μαγνητικών τοιχωμάτων επιταχύνοντας την αντιστροφή της μαγνήτισης του πυρήνα [55], όπως αναφέρθηκε και στην προηγούμενη ενότητα. Αυτή η συμπεριφορά απεικονίζεται στο Σχ. 3.12 ως ελάττωση της μαγνήτισης του πυρήνα στην κεντρική περιοχή του σύρματος μεταξύ των δυο μαγνητικών τοιχωμάτων. Εύκολα μπορούμε να παρατηρήσουμε πως ο μηχανισμός αυτός δεν εμφανίζεται στο πολυκρυσταλλικό σύστημα (ΠΣ) και στο σύστημα με τυχαία κατανομημένους άξονες εύκολης μαγνήτισης (ΤΣ), όπου η αντιστροφή της μαγνήτισης πραγματοποιείται μόνο με διάδοση μαγνητικών τοιχωμάτων. Η απενεργοποίηση του δευτερεύοντος μηχανισμού στα ΠΣ και ΤΣ νανοσύρματα οφείλεται τόσο στην αρχική μαγνητική δομή της ενδοεπιφάνειας αλλά και στο φαινόμενο συρμού. Ακόμα, η απουσία του δευτερεύοντος μηχανισμού οδηγεί στην ελάττωση της ταχύτητας διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων του πυρήνα, όπως φαίνεται στο Σχ. 3.13 αλλά και συγκρίνοντας την ευκινησία διάδοσης των τοιχωμάτων (Π. 3.4) [91, 92, 93, 94, 95]. Η συνεισφορά της μαγνήτισης της ενδοεπιφάνειας του φλοιού  $M_{A\Sigma,int}$  στη διαμόρφωση της ταχύτητας και της ευκινησίας των μαγνητικών τοιχωμάτων αποκαλύπτεται και στην εικόνα Σχ. 3.13. Το σύστημα ΤΣf έχει μεγαλύτερη τιμή  $M_{A\Sigma,int}$  από το σύστημα ΜΣ (βλέπε Σχ. 3.10) ενώ παράλληλα παρουσιάζει μικρότερη ευκινησία.

Σε μικροσκοπικό επίπεδο, η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στον αριθμό των ικανοποιημένων δεσμών της διεπιφάνειας που είναι αισθητά μεγαλύτερος στο σύστημα ΤΣf. Αυτοί οι δεσμοί βρίσκονται στην κατάσταση ελάχιστης ενέργειας (όσων αφορά τις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής) και αντιτίθενται στην αντιστροφή που προκαλεί το εξωτερικό πεδίο. Λειτουργούν δηλαδή ως κέντρα καρφώματος



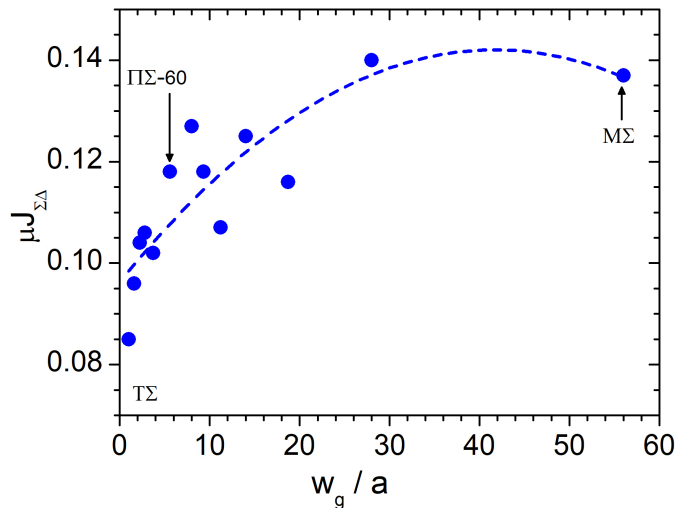
Σχήμα 3.12: Χρονική εξάρτηση των προφίλ της μαγνήτισης ( $M_z/M_s$  συναρτήσει της θέσης  $z/a$ ) υπό την ανταπόκριση σε πεδίο αντιστροφής  $H = -4.0$  νανοσυρμάτων διαφορετικού βαθμού πολυκρυσταλλικότητας. Τα στιγμιότυπα ξεκινούν από τη χρονική στιγμή at  $t_0=200$  MCSS και απεικονίζονται κάθε  $\Delta t=200$  MCSS. Τα οριζόντια βέλη δείχνουν την κατεύθυνση διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων. Οι δομικές παράμετροι απεικονίζονται στον πίνακα Π. 3.4 [91, 92, 93, 94, 95].

που δυσκολεύουν τη διάδοση των μαγνητικών τοιχωμάτων [91, 92, 93, 94, 95]. Επομένως, το γεγονός ότι παρασύρονται οι αντισιδερομαγνητικές ροπές (drag effect) αλλά και ότι αυξάνεται το μέτρο της μαγνήτισης  $M_{A\Sigma,int}$  εξαιτίας της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού είναι οι δυο παράγοντες που δρουν συνεργατικά και οδηγούν σε ελάττωση της ευκινήσιας διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων. Το



Σχήμα 3.13: Εξάρτηση της ταχύτητας  $v_{DW}$  των μαγνητικών τοιχωμάτων από το εξωτερικό πεδίο  $H/J_{\Sigma\Delta}$  σε νανοσύρματα διαφορετικού βαθμού πολυκρυσταλλικότητας. Οι ευθείες γραμμές προκύπτουν από γραμμική προσαρμογή στα δεδομένα. Παρατηρείται ελάττωση της ευκινήσις διάδοσης (κλίση) με την αύξηση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού. Οι τιμές της ευκινήσις και οι δομικές παράμετροι καταγράφονται στον πίνακα Π. 3.4 [91, 92, 93, 94, 95].

φαινόμενο απεικονίζεται συστηματικά στο Σχ. 3.14.

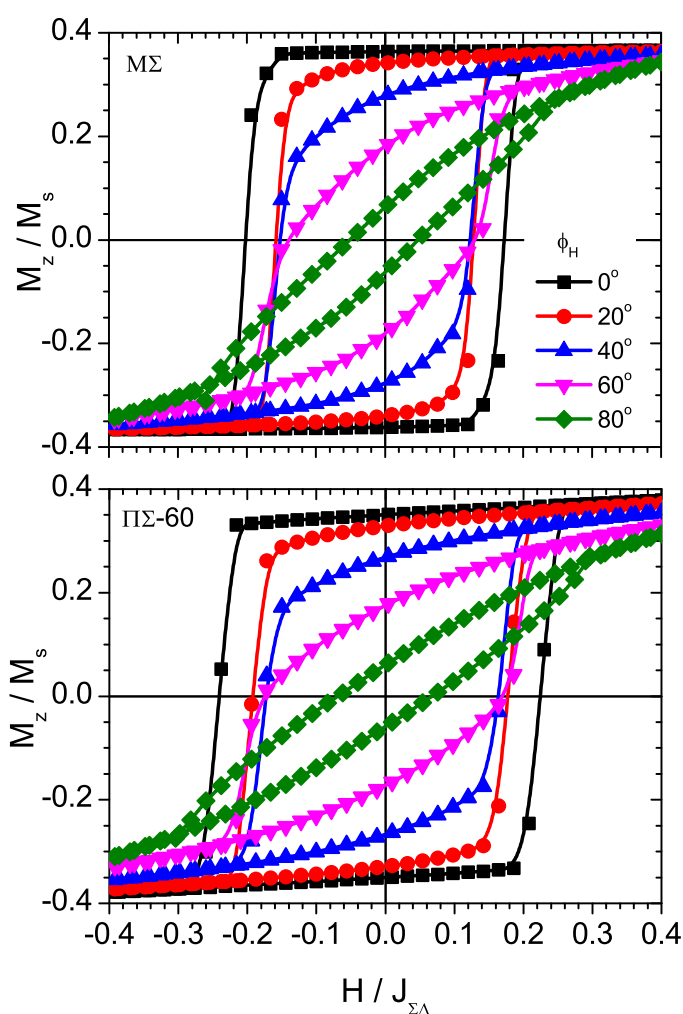


Σχήμα 3.14: Εξάρτηση της ευκινήσις διάδοσης  $\mu J_{\Sigma\Delta}$  των μαγνητικών τοιχωμάτων από το πλάτος των κρυσταλλιτών του φλοιού  $w_g/a$  [91, 92, 93, 94, 95].

### Γωνιακή εξάρτηση των πεδίων $H_c$ και $H_{eb}$

Στην παρούσα ενότητα, μελετώνται οι μεταβολές που εισάγονται στους βρόχους υστέρησης των διμαγνητικών νανοσυρμάτων, όταν το πεδίο ψύξης και το πεδίο αντιστροφής δρουν κατά μήκος διεύθυνσης που σχηματίζει γωνία  $\phi_H$  με τον άξονα του κυλίνδρου.

Στο Σχ. 3.15 απεικονίζεται η γωνιακή εξάρτηση του βρόχου υστέρησης δειγμάτων με μονοκρυσταλλικό και πολυκρυσταλλικό φλοιό. Η αύξηση της γωνίας του

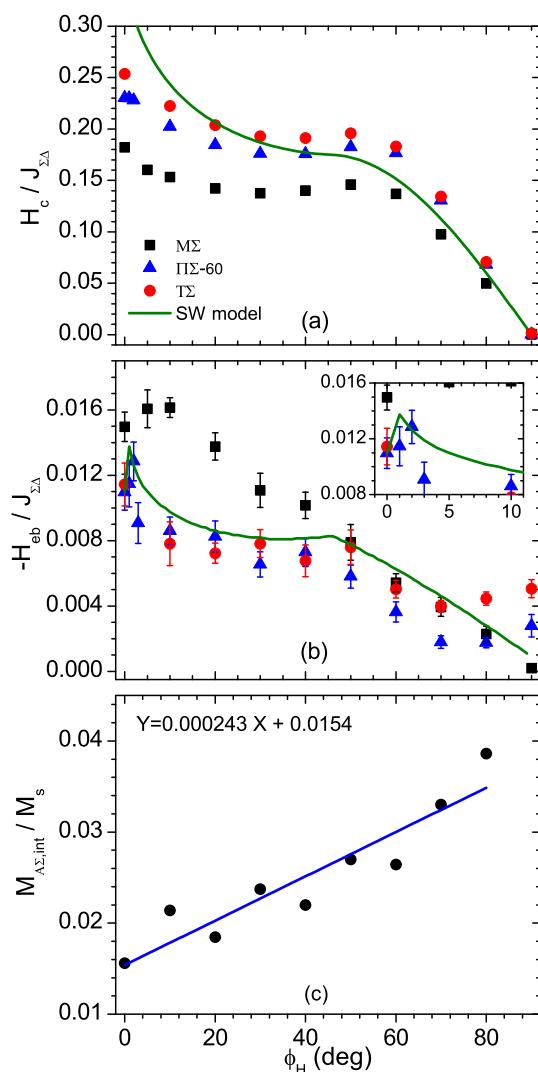


Σχήμα 3.15: Γωνιακή εξάρτηση των βρόχων υστέρησης νανοσυρμάτων με μονοκρυσταλλικό (πάνω πάνελ) και πολυκρυσταλλικό (κάτω πάνελ) φλοιό. Οι παράμετροι αναγράφονται στον πίνακα Π. 3.4 [91, 92, 93, 94, 95].

πεδίου ως προς τον άξονα του νανοσύρματος οδηγεί σε μια σταδιακή συρρίκνωση του βρόχου, καθώς τόσο η κρυσταλλογραφική ανισοτροπία αλλά και η ανισοτροπία σχήματος βρίσκονται κατά μήκος του άξονα του κυλίνδρου. Η πολυκρυσταλλικότητα του φλοιού δεν μεταβάλλει αυτή τη συμπεριφορά. Στο Σχ. 3.16 υπολογίζεται το συνεκτικό πεδίο  $H_c$  και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής  $H_{eb}$  σε διαφορετικές γωνίες. Μια μονότονη ελάττωση του πεδίου  $H_c$  με την γωνία παρατηρείται σε όλα τα συστήματα. Επίσης, η διαφορά στις τιμές του συνεκτικού πεδίου μεταξύ των τριών συστημάτων διατηρείται σε όλες τις γωνίες. Το φαινόμενο αυτό οφείλεται στο φαινόμενο συρμού που αναλύθηκε προηγουμένως (Σχ. 3.10).

Μια πιο σύνθετη συμπεριφορά παρατηρείται στη γωνιακή εξάρτηση του  $H_{eb}$  από τη γωνία  $\phi_H$  (Σχ. 3.16b). Συγκεκριμένα, το μονοκρυσταλλικό νανόσυρμα παρουσιάζει μια ασθενή αύξηση του  $H_{eb}$  σε μικρές γωνίες. Η μέγιστη αυτή τιμή παρατηρείται στις  $\phi_b \approx 10^\circ$  περίπου. Το φαινόμενο αυτό αποδίδεται στον ανταγωνισμό μεταξύ δυο διακριτών παραγόντων, της επιδεκτικότητας του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού και της προβολής του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής στην κατεύθυνση του πεδίου [91, 92, 93, 94, 95]. Αρχικά, τονίζουμε ότι ο αντισιδηρομαγνητικός φλοιός του μονοκρυσταλλικού συστήματος είναι "σκληρός", δηλαδή χαρακτηρίζεται από μεγάλη ανισοτροπία κατά μήκος του z-άξονα. Επομένως, η επιδεκτικότητα του φλοιού αυξάνεται όταν η γωνία του πεδίου αλλάζει από την παράλληλη στην κάθετη διεύθυνση και συνεπώς η μαγνήτιση της ενδοεπιφάνειας του φλοιού ( $M_{AS,int}$ ) αυξάνει όταν το πεδίο ψύξης σχηματίζει γωνία ως προς τον z-άξονα. Πράγματι, μια γραμμική προσαρμογή  $M_{AS,int} \sim M_0 + \lambda\phi_b$ , απεικονίζεται στο Σχ. 3.16c. Ακόμα, για καθορισμένη ενδοεπιφανειακή μαγνήτιση του φλοιού, το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής ελαττώνεται ( $H_{eb} \sim \cos \phi_H$ ) σε συμφωνία με το μοντέλο των Meiklejohn-Bean [27]. Επομένως, μια γενική εξάρτηση  $H_{eb} \sim (M_0 + \lambda\phi_H) \cdot \cos(\phi_H)$  αναμένεται για το μονοκρυσταλλικό σύστημα, η οποία χαρακτηρίζεται από μια βέλτιστη γωνία εφαρμογής του πεδίου κατά την οποία προκύπτουν μέγιστες τιμές  $H_{eb}$ . Η βέλτιστη αυτή γωνία για το αριθμητικό μοντέλο της προσομοίωσης είναι  $\phi_{max} \sim 10^\circ$ .

Όταν η πολυκρυσταλλικότητα του φλοιού είναι παρούσα, όπως στα συστήματα ΠΣ και ΤΣ, ο φλοιός γίνεται μαγνητικά "μαλακότερος" και η τιμή του  $H_{eb}$  ελαττώνεται. Ακόμα, εξαιτίας την τυχαίας διασποράς των αξόνων εύκολης μαγνήτισης των κρυσταλλιτών του φλοιού, η επιδεκτικότητα του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού γίνεται πιο ιστροπική, γεγονός που οδηγεί στην εξαφάνιση της μέγιστης τιμής του  $H_{eb}$  στις  $\sim 10^\circ$ . Παρόλα αυτά, μια απότομη (αλλά ασθενής) αύξηση του  $H_{eb}$  παρα-



Σχήμα 3.16: Γωνιακή εξάρτηση του (a) συνεκτικού πεδίου  $H_c / J_{\Sigma\Delta}$  και (b) του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής  $H_{eb} / J_{\Sigma\Delta}$  από την γωνία του εξωτερικού πεδίου  $\phi_H$ , για τα διαφορετικά συστήματα που περιγράφονται στον Π. 3.4. Η ευθεία είναι γραμμική προσαρμογή των δεδομένων της προσομοίωσης, με παραμέτρους  $k = 3.5$ ,  $k_R = 0.2$ ,  $h_b = 0.11$  και  $\phi_b = 5^\circ$  στο μοντέλο των Stoner-Wohlfarth. Τα σφάλματα, όταν δεν απεικονίζονται, είναι στο μέγεθος των συμβόλων. (c) Γραμμική εξάρτηση της μαγνήτισης της ενδοεπιφάνειας του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού ( $M_{A\Sigma,int}$ ) του μονοκρυσταλλικού συστήματος (ΜΣ) από την γωνία του εξωτερικού πεδίου  $\phi_H$  [91, 92, 93, 94, 95].

τηρείται στα πολυκρυσταλλικά δείγματα σε διευθύνσεις που αποκλίνουν ελαφρώς από τον άξονα των κυλίνδρων. Αυτή η συμπεριφορά, παρά το γεγονός ότι είναι πολύ ασθενής μπορεί να κατανοηθεί μέσω ενός αναλυτικού μοντέλου MB.

### Αναλυτικό μοντέλο Meiklejon - Bean

Σε αυτή την ενότητα, γίνεται προσαρμογή των δεδομένων της προσομοίωσης σε ένα μοντέλο Meiklejon - Bean (MB). Το μοντέλο περιγράφεται από την εξής σχέση,

$$e(\phi) = -\frac{1}{2} \cdot k \cdot \cos^2(\phi) - h \cdot \cos(\phi - \phi_H) - h_b \cdot \cos(\phi - \phi_b) - \frac{1}{2} \cdot k_R \cdot \cos^2(\phi - \phi_H) \quad (3.6)$$

όπου,  $k$  είναι η ανισοτροπία του σιδηρομαγνήτη που ορίζεται κατά μήκος του z-άξονα,  $h$  το εξωτερικό πεδίο σε γωνία  $\phi_H$ ,  $h_b$  το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής σε γωνία  $\phi_b$  και  $k_R$  είναι η ενεργός ανισοτροπία εξαιτίας του φαινομένου συρμού των αντισιδηρομαγνητικών ροπών της ενδοεπιφάνειας [106]. Οι τιμές των αδιαβάθμητων παραμέτρων της Εξ. 3.6 προκύπτουν από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης (Σχ. 3.16), ως εξής [106],  $k_R = \frac{1}{2} H_c^{(mc)} / K_{\Sigma\Delta}^{(mc)} - 1 \approx 0.2$  και  $h_b = H_{eb}^{(mc)} \approx 0.11$ . Η ανισοτροπία  $k$  δεν προσαρμόζεται στην ανισοτροπία της προσομοίωσης [106] καθώς θεωρείται παράμετρος της περιγραφής. Αυτό οφείλεται στο γεγονός πως ο μηχανισμός σύμφωνης στροφής, ως ενδογενής παραδοχή του μοντέλου MB, υπερεκτιμά το συνεκτικό πεδίο ( $H_c$ ) για εξωτερικό πεδίο κατά μήκος του άξονα εύκολης μαγνήτισης. Η γωνία  $\phi_b$  αντιμετωπίζεται επίσης ως παράμετρος. Πραγματοποιείται αριθμητική ελαχιστοποίηση της Εξ. 3.6, που οδηγεί για κάθε τιμή πεδίου  $h$  σε ένα (αντιστρεπτή διαδικασία) ή δυο ακραία σημεία (μη αντιστρεπτή διαδικασία) που αντιστοιχούν στη μαγνήτιση / μαγνητίσεις ισορροπίας. Στα Σχ. 3.16a,b συγκρίνουμε τα αποτελέσματα του μοντέλου MB για τη γωνιακή εξάρτηση των πεδίων  $H_c$  και  $H_{eb}$  με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης Monte Carlo. Παρατηρείται ότι τα δεδομένα της προσομοίωσης Monte Carlo για την γωνιακή εξάρτηση των πεδίων  $H_{eb}$  και  $H_c$  περιγράφονται επιτυχώς από το μοντέλο MB με ενεργό μονοκατευθυντική ανισοτροπία σε διεύθυνση που σχηματίζει γωνία  $\phi_b \sim 5^\circ$  με τον άξονα του κυλίνδρου [91].

Όπως έχει καταγραφεί, στην περίπτωση των διμαγνητικών υμενίων, μια ενεργός εκτός του άξονα ανισοτροπία αναδύεται από μη ικανοποιημένες (frustrated) αντισιδηρομαγνητικές ροπές της ενδοεπιφάνειας εξαιτίας της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας [106]. Στην περίπτωση των συστημάτων που μελετώνται σε αυτή την ενότητα, το φαινόμενο προκαλείται από την αταξία της ανισοτροπίας της ενδοεπιφάνειας που οφείλεται στην πολυκρυσταλλικότητα του φλοιού.

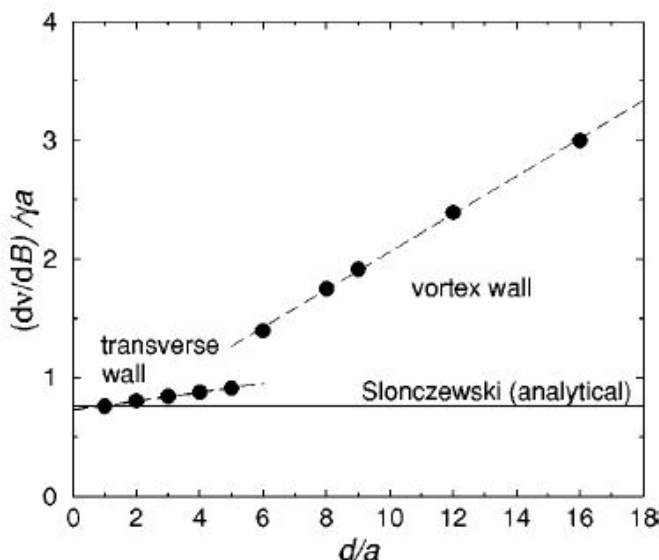
Ως τελικό σχόλιο, πραγματοποιείται σύγκριση των αριθμητικών αποτελεσμάτων με πρόσφατα πειραματικά αποτελέσματα σε νανοσύρματα Co/CoO που έχουν κατασκευαστεί με τη μέθοδο της ηλεκτροαπόθεσης [75]. Οι πειραματικές μελέτες αποκαλύπτουν γιγαντιαίες τιμές για το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής και ενεργό εκτός του άξονα μονοκατευθυντική ανισοτροπία σε γωνία  $\phi_b \sim 30^\circ$  που οδηγεί τελικά σε  $\sim 20\%$  αύξηση της τιμής του πεδίου όταν το πεδίο ψύξης εφαρμόζεται σε γωνία  $\phi_H \sim 30^\circ$  ως προς τον άξονα του σύρματος. Η προσομοίωση για τα νανοσύρματα Co/CoO, αναπαράγει μια παρόμοια συμπεριφορά, δηλαδή εμφάνιση μιας εκτός του άξονα ενεργό ανισοτροπία ( $\phi_b \sim 5^\circ$ ) και ασθενή ( $\sim 10\%$ ) αύξηση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής όταν το πεδίο αντιστροφής εφαρμόζεται σε γωνία  $\phi_H \sim 1^\circ$  ως προς τον άξονα του νανοσύρματος. Επίσης, η προσομοίωση αναδεικνύει την πολυκρυσταλλικότητα του φλοιού ως πηγή δημιουργίας εκτός του άξονα ανισοτροπίας, φαινόμενο που ενισχύει το ΦΠΑ σε διμαγνητικά νανοσύρματα μορφολογίας πυρήνα φλοιού [91]. Ωστόσο, η ποσοτική απόκλιση μεταξύ των αριθμητικών και πειραματικών [75] αποτελεσμάτων οφείλεται στην μεγάλη ισχύ του ΦΠΑ στις πειραματικές μετρήσεις, που κατά πάσα πιθανότητα προέρχεται από λεπτομέρειες της ενδοεπιφάνειας των δειγμάτων σε ατομικό επίπεδο που οδηγούν σε μη ισοσταθμισμένη ενδοεπιφάνεια, όπως πχ οι κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις και η ενδοεπιφανειακή τραχύτητα, που δεν λαμβάνονται υπόψη στους αντίστοιχους υπολογισμούς της προσομοίωσης.

### 3.3.3 Χαρακτήρας των μαγνητικών τοιχωμάτων

Ένα ακόμα χαρακτηριστικό που καθορίζει την αντιστροφή της μαγνήτισης είναι ο χαρακτήρας των μαγνητικών τοιχωμάτων. Οι Hinzke και Nowak [49] έδειξαν πως στα σιδηρομαγνητικά νανοσύρματα μπορούν να σχηματιστούν είτε εγκάρσια μαγνητικά τοιχώματα (TDW) είτε μαγνητικές δίνες (VDW), γεγονός που εξαρτάται από την διάμετρο του σύρματος. Στα λεπτά νανοσύρματα σχηματίζονται εγκάρσια μαγνητικά τοιχώματα. Καθώς η διάμετρος του συστήματος αυξάνεται, η ελαχιστοποίηση της ενέργειας των διπολικών αλληλεπιδράσεων οδηγεί σε κλειστούς σχηματισμούς της μαγνήτισης σηματοδοτώντας την μετάβαση από TDW σε VDW. Ακόμα, οι Wieser *et al* έδειξαν πως ο τύπος του μαγνητικού τοιχώματος είναι καθοριστικός για την ευκινησία διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων [50]. Συγκεκριμένα, απέδειξαν πως οι μαγνητικές δίνες που σχηματίζονται σε νανοσύρματα μεγάλης διαμέτρου διαδίδονται ταχύτερα από τα εγκάρσια τοιχώματα που σχημα-



τίζονται σε νανοσύρματα μικρής διαμέτρου (Σχ.3.17).



Σχήμα 3.17: Ευκινησία διάδοσης συναρτήσει της διαμέτρου σε κυλινδρικά νανοσύρματα. Παρατηρείται αύξηση της ευκινησίας σε κυλινδρικά συστήματα μεγάλης διαμέτρου όπου σχηματίζονται μαγνητικές δίνες [50].

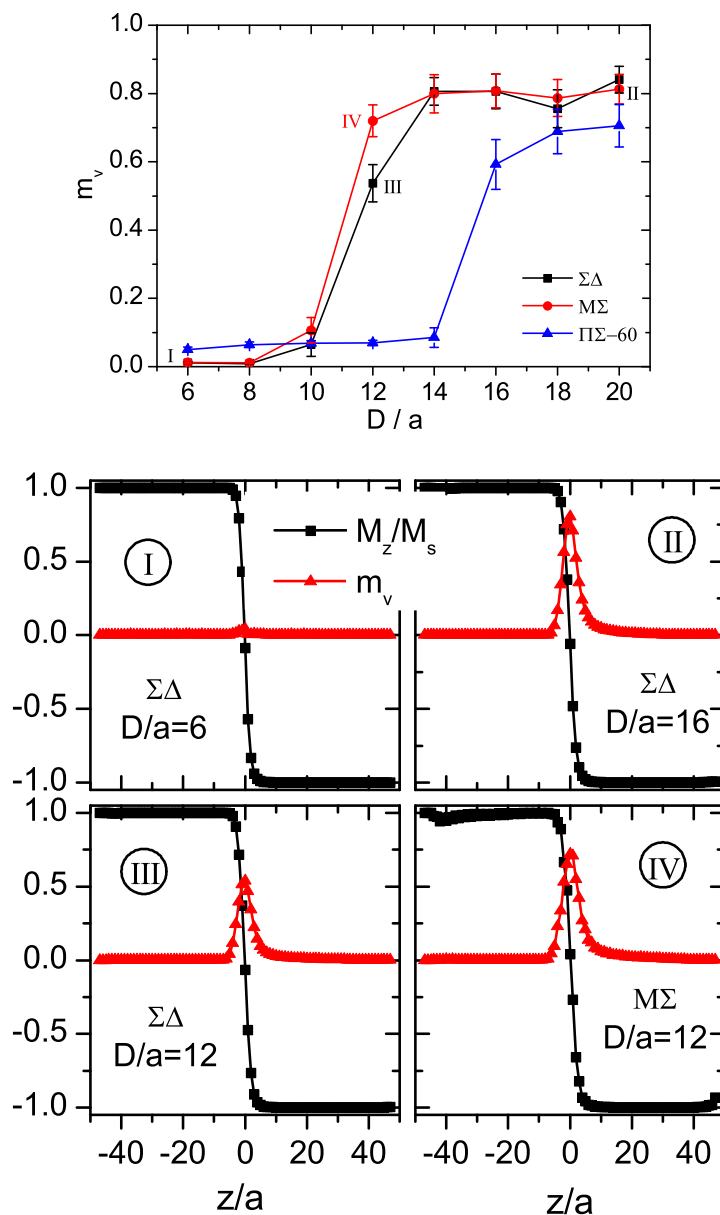
Στην παρούσα ενότητα εξετάζουμε την επίδραση του ΦΠΑ στη μετάβαση από το ένα είδος μαγνητικών τοιχωμάτων στο άλλο σε μαγνητικά νανοσύρματα [96]. Θεωρούμε επαρκώς μακριά σύρματα ( $L_c = 100a$ ) έτσι ώστε το συνεκτικό πεδίο και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής να παραμένουν ανεξάρτητα από το μήκος του συστήματος. Τα νανοσύρματα αρχικά μεταβαίνουν στην κατάσταση ψύξης υπό πεδίο μέσω της γνωστής διαδικασίας και στη συνέχεια ένα πεδίο αντιστροφής εφαρμόζεται έτσι ώστε να ξεκινήσει η αντιστροφή της μαγνήτισης. Κατά τη διαδικασία αυτή, "παγώνουμε" τις μαγνητικές ροπές του ενός άκρου του σύρματος, αφήνοντας έτσι ελεύθερο μόνο το ένα άκρο. Κάτω από αυτές τις χωρικές συνθήκες, ένα μόνο μαγνητικό τοίχωμα σχηματίζεται στο ελεύθερο άκρο και διαδίδεται προς το κέντρο του νανοσύρματος. Ο χαρακτήρας του μαγνητικού τοιχώματος (εγκάρσιο ή δίνη) υπολογίζεται από τη σχέση Σχ. 1.72 που μετράει τον στροβιλισμό της μαγνήτισης ( $m_v$ ) [36]. Συγκεκριμένα,  $m_v = 0$  για τα εγκάρσια τοιχώματα και  $m_v = \pm 1$  για τις μαγνητικές δίνες ενώ το πρόσημο φανερώνει τη διεύθυνση της περιστροφής στο επίπεδο  $x - y$ . Ο στροβιλισμός των νανοσυρμάτων σταθερού μήκους ( $L_c = 100a$ ) υπολογίζεται τη στιγμή που η μαγνήτιση του συστήματος μηδενίζεται ( $M = 0$ ), δηλαδή τη στιγμή που το μαγνητικό τοίχωμα βρίσκεται στο κέντρο του νανοσύρματος ( $z = 0$ ).

Στο Σχ. 3.18 απεικονίζεται η εξάρτηση του στροβιλισμού της μαγνήτισης  $m_v$  από την διάμετρο του πυρήνα, για τρεις διαφορετικές περιπτώσεις νανοσυρμάτων έτσι ώστε να αναδειχθεί η επίδραση του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού αλλά και της πολυκρυσταλλικότητας στη μετάβαση από την κατάσταση των εγκάρσιων μαγνητικών τοιχωμάτων στις μαγνητικές δίνες. Αρχικά, μετάβαση στο χαρακτήρα του τοιχώματος παρατηρείται καθαρά για όλους τους τύπου νανοσυρμάτων. Ωστόσο, ο στροβιλισμός δεν λαμβάνει τιμή ίση με τη μονάδα για διαμέτρους πάνω από  $D = 60\text{nm}$ , εξαιτίας των θερμικών (στατιστικών) φαινομένων, που αποτελεί ενδογενές χαρακτηριστικό της μεθόδου Monte Carlo και του περιορισμένου μήκους των νανοσυρμάτων που μοντελοποιούνται.

Στα διμαγνητικά συστήματα η μετάβαση λαμβάνει χώρα σε ελαφρώς μικρότερες διαμέτρους ( $D_{crit} \approx 12\text{a}$ ) συγκριτικά με τα αμιγώς σιδηρομαγνητικά νανοσύρματα ( $D_{crit} \approx 14\text{a}$ ). Ο σχηματισμός των μαγνητικών δινών είναι το αποτέλεσμα της ελαχιστοποίησης της ενέργειας, που περιλαμβάνει αφενός τις διπολικές αλληλεπιδράσεις που ευνοούν κλειστούς και εντός του επιπέδου σχηματισμούς της μαγνήτισης (δίνες) σε κυλινδρικές νανοδομές και αφετέρου στη σύζευξη ανταλλαγής μεταξύ του σιδηρομαγνητικού πυρήνα και του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού που είναι κατά προσέγγιση αντίστοιχη με την δράση ενός ("παγωμένου") τοπικού πεδίου στις ενδοεπιφανειακές ροπές του πυρήνα και ευνοεί την αντιστροφή τους, όπως εξηγήθηκε σε προηγούμενη ενότητα. Συνεπώς, τα διμαγνητικά νανοσύρματα εμφανίζονται μαγνητικά "μαλακότερα", γεγονός που επιτρέπει το σχηματισμό των δινών σε ελαφρώς μικρότερες διαμέτρους. Αντίθετα, η πολυκρυσταλλικότητα του φλοιού (ΠΣ) καθιστά τις ροπές μαγνητικά "σκληρότερες", αφού σε αυτή την περίπτωση οι μαγνητικές ροπές του πυρήνα παρασύρουν τις ενδοεπιφανειακές ροπές του φλοιού και επομένως δυσχεραίνει τον σχηματισμό των δινών [96]. Το φαινόμενο απεικονίζεται ευκρινώς στο Σχ. 3.18, όπου η μετάβαση από εγκάρσια μαγνητικά τοιχώματα σε τοιχώματα τύπου δίνης παρατηρείται σε μεγαλύτερες διαμέτρους.

### 3.4 Συμπεράσματα

Πραγματοποιήθηκε μικρομαγνητική μοντελοποίηση του φαινομένου πόλωσης-ανταλλαγής σε κυλινδρικά νανοσύρματα σιδηρομαγνητικού πυρήνα και αντισιδηρομαγνητικού φλοιού, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Metropolis Monte Carlo. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι η ενδοεπιφανειακή σύζευξη ανταλλαγής προκαλεί



Σχήμα 3.18: Εξάρτηση του στροβιλισμού της μαγνήτισης  $m_v$  από τη διάμετρο του πυρήνα  $D/a$  (πάνω πάνελ) και τα αντίστοιχα προφίλ της μαγνήτισης κατά μήκος του άξονα του κυλίνδρου ( $M_z/M_s$  συναρτήσει της θέσης  $z/a$ ) όταν το μαγνητικό τοίχωμα περάσει από το κέντρο του νανοσύρματος (κάτω πάνελ). Το μήκος του πυρήνα του νανοσύρματος είναι  $L_c = 300\text{nm}$  και το πάχος του φλοιού  $t_{sh} = 9\text{nm}$ . Τα στατιστικά σφάλματα υπολογίζονται σε μια συλλογή 50 διαφορετικών δειγμάτων [96].

ελάττωση του συνεκτικού πεδίου και εμφάνιση ενός ασθενούς πεδίου πόλωσης ανταλλαγής [55, 56, 57, 58, 59], σε συμφωνία με πρόσφατες πειραματικές μετρήσεις σε νανοσύρματα  $\text{Co/CoO}$  [73].

Επίσης, παρατηρείται ότι το ΦΠΑ διαμορφώνει τον μηχανισμό αντιστροφής της μαγνήτισης και οδηγεί σε αύξηση της ταχύτητας και της ευκινησίας των μαγνητικών τοιχωμάτων. Οι μη ικανοποιημένοι δεσμοί της ΣΔ / ΑΣ ενδοεπιφάνειας λειτουργούν ως μια ομοιόμορφη διασπορά κέντρων ενεργοποίησης ενός δευτερεύοντος μηχανισμού αντιστροφής με χαρακτηριστικά σύμφωνης στροφής που ενισχύει την αντιστροφή της μαγνήτισης. Καθώς ο βαθμός μη ισοστάθμισης αυξάνεται, ή αντίστοιχα η ισχύς του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής αυξάνεται, για παράδειγμα εξαιτίας της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας ή ενός χαμηλής συμμετρίας άξονα του κυλίνδρου, ο δευτερεύων μηχανισμός αντιστροφής ενισχύεται [55, 56, 57, 58, 59].

Ακόμα, μελετήθηκε η επίδραση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού, διαπιστώνοντας ενίσχυση του συνεκτικού πεδίου και ελάττωση του πεδίου πόλωσης-ανταλλαγής. Η συμπεριφορά αυτή αποδίδεται κυρίως στο φαινόμενο συρμού κατά το οποίο οι σιδηρομαγνητικές ροπές παρασύρουν κατά την αντιστροφή αντισιδηρομαγνητικές ροπές της ενδοεπιφάνειας. Το ίδιο φαινόμενο προκαλεί ελάττωση της ευκινησίας διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων. Επίσης, παρατηρήθηκε αύξηση του πεδίου πόλωσης-ανταλλαγής όταν το εξωτερικό πεδίο δρα σε διεύθυνση που σχηματίζει γωνία με το μεγάλο άξονα των κυλινδρικών νανοσυρμάτων. Το φαινόμενο εξασθενεί με την αύξηση της πολυκρυσταλλικότητας [91, 92, 93, 94, 95]. Τα αποτελέσματα είναι σε ποιοτική συμφωνία με αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα σε νανοσύρματα Co/CoO [75].

Τέλος, η παρουσία του ΦΠΑ σε ένα διμαγνητικό νανόσυρμα ελαττώνει την κρίσιμη διάμετρο μετάβασης από εγκάρσια μαγνητικά τοιχώματα σε μαγνητικές δίνες [96].

## Κεφάλαιο 4

# Δυναμική μαγνητικών τοιχωμάτων σε γεωμετρικά διαμορφωμένα νανοσύρματα

### 4.1 Εισαγωγή

Ο σχεδιασμός σπιντρονικών διατάξεων βασισμένων στη δημιουργία και τη μεταφορά μαγνητικών τοιχωμάτων απαιτεί τον έλεγχο της διάδοσης αυτών των τοιχωμάτων. Έχουν προταθεί διάφοροι τρόποι για την επίτευξη αυτού του ελέγχου, όπως η περιοδική χημική ή γεωμετρική διαμόρφωση των σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων και νανολωρίδων, η δημιουργία εγκοπών και οπών [107] κατά μήκος των συστημάτων αυτών κα.

Ο σχεδιασμός νανολωρίδων διαμορφούμενου πλάτους ή και σχήματος έχει αποδειχτεί αξιόπιστη μέθοδος για τον ελεγχόμενο σχηματισμό και τη διάδοση μαγνητικών τοιχωμάτων. Οι περιοχές μεγάλης διαμέτρου είναι μαγνητικά "μαλακές" με χαμηλά πεδία αντιστροφής και αξιοποιούνται ως περιοχές τροφοδοσίας μαγνητικών τοιχωμάτων. Αντίστοιχα, οι περιοχές μικρής διαμέτρου είναι μαγνητικά "σκληρές". Με αυτό τον τρόπο, τα μαγνητικά τοιχώματα μπορούν να εντοπιστούν στις ενδιάμεσες περιοχές και επιλεκτικά πλέον να διαδίδονται στις λεπτές περιοχές των νανοσυρμάτων [108]. Η εφαρμογή αυτής της ιδέας επεκτείνεται σε διάφορα συστήματα όπως νανολωρίδες CoNi/Pt [109], Co/Pt [110, 111, 112] και Permalloy που κατασκευάζονται με μεθόδους ηλεκτρονικής λιθογραφίας.

Στην ίδια λογική κατασκευάζονται κυλινδρικά νανοσύρματα διαμορφούμενης

διαμέτρου. Ενδεικτικά, έχουν κατασκευαστεί νανοσύρματα νικελίου (Ni) διαστάσεων διάμετρος / μήκος 30 - 100 nm / 1 - 10μm [113, 114, 115, 116, 117, 118] των οποίων οι μαγνητικές ιδιότητες, όπως η δομή των μαγνητικών τοιχωμάτων, έχουν χωρική εξάρτηση. Ακόμα, διτμηματικά κυλινδρικά νανοσύρματα  $Ni_{80}Fe_{20}$  διαμορφωμένα σε τμήματα διαφορετικής διαμέτρου και μήκους μελετήθηκαν και διαπιστώθηκε πως μαγνητικές δίνες σχηματίζονται στην περιοχή μετάβασης από το ένα τμήμα στο άλλο και διαδίδονται ως τα άκρα των συρμάτων με διαφορετικές ταχύτητες διάδοσης [119].

Οι Toscano *et al* χρησιμοποίησαν μικρομαγνητικές μεθόδους για να μελετήσουν την "παγίδευση" των μαγνητικών τοιχωμάτων μεταξύ περιοχών διαφορετικών μαγνητικών προσμίξεων. Παρατήρησαν αρχικά την παγίδευση των τοιχωμάτων μεταξύ αυτών των περιοχών, ενώ στη συνέχεια με ένα εξωτερικό μαγνητικό παλμό κατάφεραν να αντιστρέψουν την πόλωση των τοιχωμάτων [101]. Οι Arzura *et al* μελέτησαν γεωμετρικά διαμορφωμένα νανοσύρματα και διαπίστωσαν μεταβολή του χαρακτήρα των μαγνητικών τοιχωμάτων καθώς αυτά διέσχιζαν την περιοχή μετάβασης από τις στενές στις πιο φαρδιές περιοχές [120]. Οι Fernandez-Roldan *et al* πραγματοποίησαν θεωρητική μελέτη (αριθμητική και αναλυτική) του σχηματισμού εγκάρσιων μαγνητικών τοιχωμάτων σε διαφορετικού τύπου διεπαφές γεωμετρικά διαμορφωμένων μαγνητικών νανοσυρμάτων. Αποτέλεσμα αυτής της μελέτης είναι η δημιουργία αναλυτικής έκφρασης για τον υπολογισμό του κρίσιμου πεδίου που οδηγεί στη μετάβαση των εγκάρσιων μαγνητικών τοιχωμάτων από τη μια περιοχή της διεπαφής στην άλλη, σε ομαλές διεπαφές [121]. Τέλος, οι Chandra Sekhar *et al* διαπίστωσαν διαφορές στην πυκνότητα ρεύματος που απαιτείται για τη μετακίνηση των μαγνητικών τοιχωμάτων στις περιοχές διαφορετικής διαμέτρου γεωμετρικά διαμορφωμένων μαγνητικών νανοσυρμάτων [122].

Στο κεφάλαιο αυτό, μελετώνται δυο τύποι τριτμηματικών νανοσυρμάτων Ni. Σε κάθε τύπο τα εξωτερικά τμήματα έχουν την ίδια διάμετρο ενώ χωρίζονται από ένα ενδιάμεσο τμήμα που έχει διαφορετική διάμετρο. Στη μία περίπτωση η διάμετρος του ενδιάμεσου τμήματος είναι μεγαλύτερη και στην άλλη μικρότερη από εκείνη των εξωτερικών τμημάτων. Με αυτό τον τρόπο σχηματίζονται μαγνητικές ετεροδομές που αποτελούνται από δυο φάσεις του ίδιου υλικού διαφορετικής όμως μαγνητικής ανισοτροπίας [123].

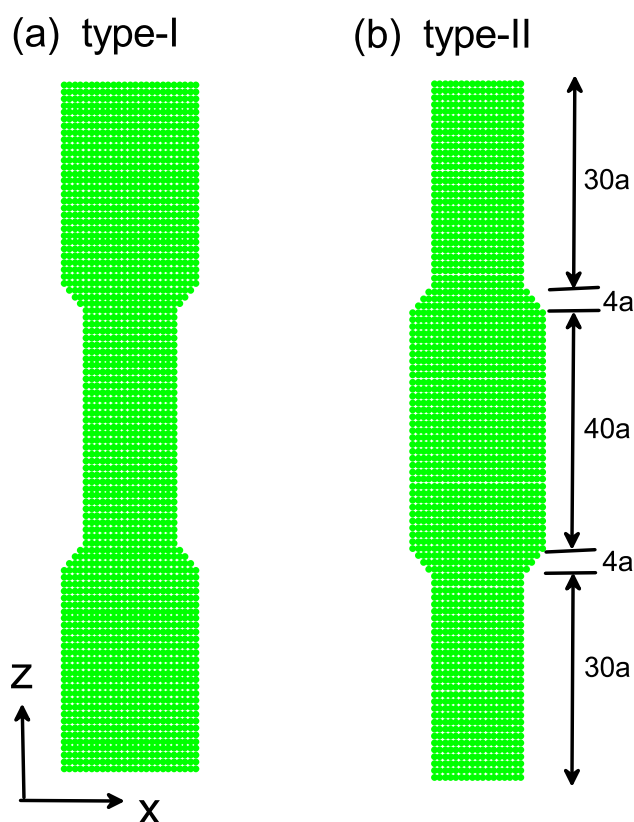
## 4.2 Μοντελοποίηση και μέθοδος προσομοίωσης

Μαγνητικά νανοσύρματα σχηματίζονται κατά μήκος του z-άξονα και διακριτοποιούνται σε ένα απλό κυβικό πλέγμα σταθεράς  $a$ . Κατασκευάζονται δύο τύποι συρμάτων. Στον πρώτο τύπο (type-I) τα άκρα του σύρματος είναι φαρδύτερα και ενδιάμεσως παρεμβάλλεται ένα στενό τμήμα. Στο δεύτερο τύπο (type-II) ακολουθεί η αντίθετη διαδικασία, δηλαδή, δυο στενά άκρα διαχωρίζονται από ένα πιο φαρδύ τμήμα. Οι διάμετροι των τμημάτων και στους δυο τύπους είναι ίδιοι. Το στενό τμήμα έχει διάμετρο  $D_1 = 16a$  ενώ το φαρδύ  $D_2 = 24a$ , σε ακολουθία με πειραματικά δείγματα όπου  $D_2 / D_1 \approx 1.40 - 1.50$ . Οι περιοχές που συνδέουν τα στενά και φαρδιά τμήματα έχουν μήκος  $L = 4a$  και περιγράφονται κατά προσέγγιση από μια γραμμική διαμόρφωση της διαμέτρου. Οι ακολουθία των μηκών των τριών περιοχών είναι  $30a-40a-30a$  και για τους δυο τύπους συστημάτων. Τα νανοσύρματα απεικονίζονται στο Σχ. 4.1.

Για τη μελέτη της μαγνητικής διάταξης και της ισόθερμης υστέρησης χρησιμοποιείται η μέθοδος Metropolis Monte Carlo και η κλασική Χαμιλτονιανή που έχει περιγραφεί και στο προηγούμενο κεφάλαιο. Χρησιμοποιούνται μικρομαγνητικές παράμετροι που περιγράφουν ικανοποιητικά το Ni, δηλαδή, τη σταθερά ανταλλαγής  $A = 1.3 \cdot 10^{-11} \text{ J / m}$  και τη μαγνήτιση κόρου  $M_s = 7.6 \cdot 10^5 \text{ A / m}$ , ενώ η μαγνητική ανισοτροπία δεν περιλαμβάνεται στους υπολογισμούς. Το πλέγμα αποτελείται από κόκκους πλευράς  $\alpha = 5 \text{ nm}$ . Όλοι οι υπολογισμοί πραγματοποιούνται σε χαμηλή θερμοκρασία  $T / J = 10^{-3}$ .

## 4.3 Αριθμητικά Αποτελέσματα

Στο σχήμα Σχ. 4.2 απεικονίζονται βρόχοι που έχουν μετρηθεί πειραματικά μέσω της μεθόδου MOKE, σε τριμηματικά νανοσύρματα. Παρατηρούνται τετράγωνοι βρόχοι υστέρησης για τα νανοσύρματα τύπου II. Το φαινόμενο δεν αποκλίνει με κάποιο τρόπο από τις συνηθισμένες παρατηρήσεις σε σιδηρομαγνητικά νανοσύρματα σταθεράς διαμέτρου [124, 125]. Αντίθετα, διαφορετική συμπεριφορά παρατηρείται στους βρόχους των νανοσυρμάτων τύπου I. Πιο συγκεκριμένα, παρατηρείται σχηματισμός δυο συμμετρικών "γονάτων" στους βρόχος υστέρησης αυτών των συστημάτων, γεγονός που υποδηλώνει την παρουσία δυο διακριτών πεδίων αντιστροφής [123]. Το φαινόμενο αυτό είναι χαρακτηριστικό σε συστήματα που αποτελούνται από δυο φάσεις διαφορετικής ανισοτροπίας και έχει παρατηρηθεί

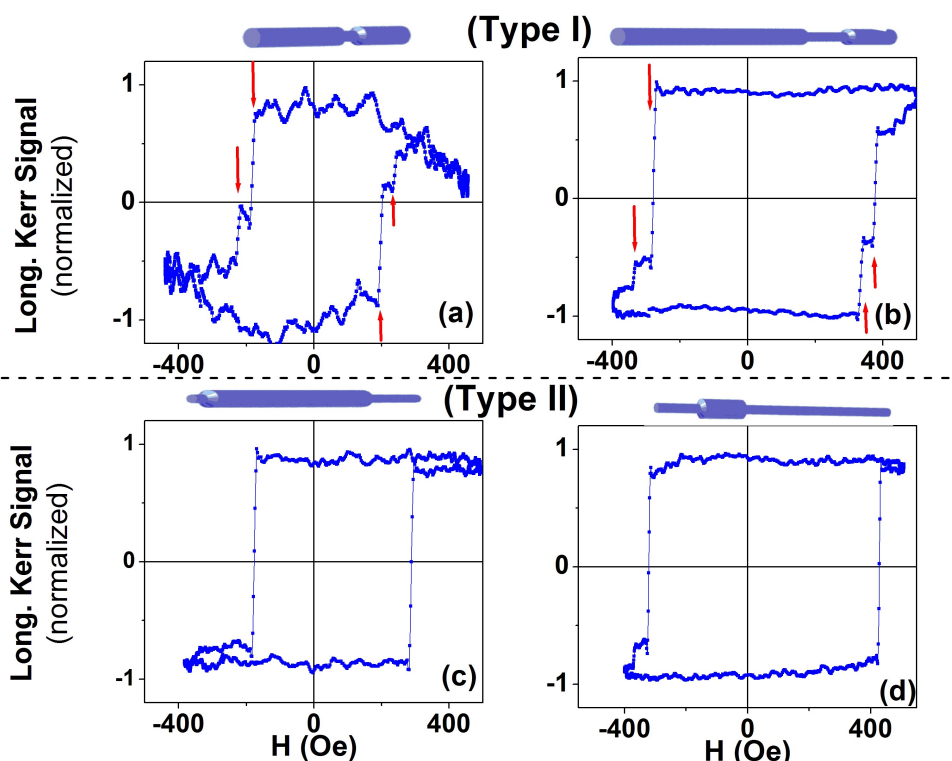


Σχήμα 4.1: Επιμήκειες διατομές για δυο διαφορετικούς τύπους (type I, II) γεωμετρικά διαμορφωμένων σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων. Οι διάμετρος των στενών τμημάτων είναι  $D_1 = 16a$  και των φαρδιών τμημάτων  $D_2 = 24a$ . Το μήκος της διεπαφής είναι  $L = 4a$ , ενώ τα μήκη των τμημάτων και στους δυο τύπους συρμάτων είναι  $30a - 40a - 30a$  [123].

σε αντίστοιχα συστήματα [114, 124]. Παρόλα αυτά δεν δόθηκε σαφής ερμηνεία του φαινομένου.

Για να γίνει κατανοητή η παρουσία των δυο διακριτών πεδίων αντιστροφής υπολογίζεται Σχ. 4.3 το συνεκτικό πεδίο συμβατικών σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων διαφορετικής διαμέτρου  $D_1 = 16a$  και  $D_2 = 24a$ , που ισοδυναμούν με τις διαμέτρους των διαφορετικών τμημάτων των τριτμηματικών νανοσυρμάτων. Παρατηρείται πως σε όλα τα διαφορετικά μήκη το συνεκτικό πεδίο του λεπτότερου συστήματος είναι μεγαλύτερο ( $H_c^{high}$ ) από εκείνο του φαρδύτερου ( $H_c^{low}$ ). Αυτό συμβαίνει καθώς αυτό το σύστημα προσεγγίζει περισσότερο την οριακή κατάσταση της λεπτής βελόνας στην οποία η τιμή του συνεκτικού πεδίου παίρνει την μέγιστή της τιμή. Το φαινόμενο αυτό δικαιολογεί την ύπαρξη των δυο διακριτών πεδίων αντιστροφής στα τμήματα διαφορετικής διαμέτρου των τριτμηματικών να-



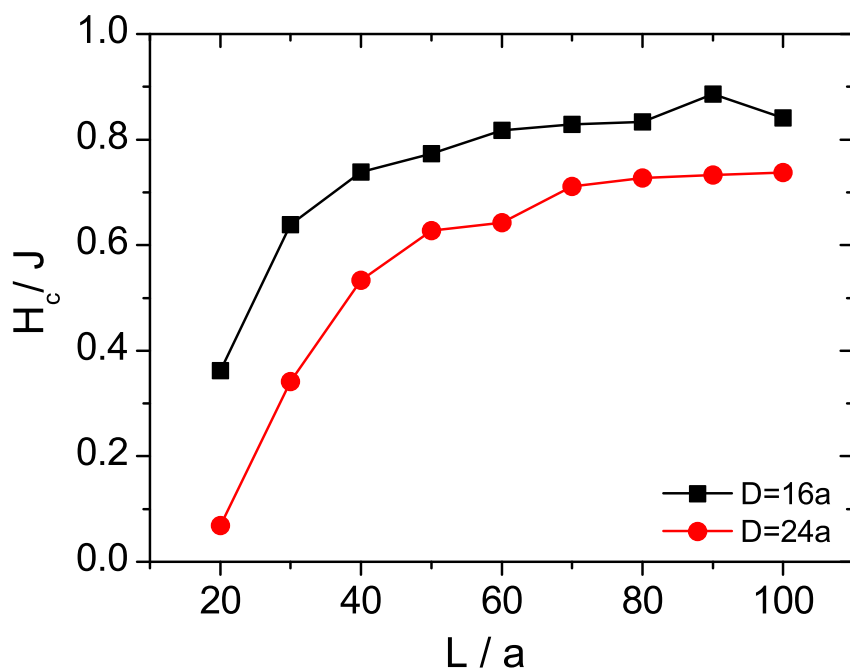


Σχήμα 4.2: Βρόχοι υστέρησης γεωμετρικά διαμορφωμένων σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων. Στα συστήματα τύπου I παρατηρείται ο σχηματισμός ενός "γωνάτου" κατά την αντιστροφή που οφείλεται στην παρουσία δυο διακριτών φάσεων διαφορετικής μαγνητικής ανισοτροπίας. Το φαινόμενο δεν είναι διακριτό στα συστήματα τύπου II. Οι πειραματικές μετρήσεις πραγματοποιήθηκαν μέσω της μεθόδου MOKE από τους Seyed-Majid Peighambari-Sattari, Cristina Bran, Ester M Palmero και Eider Berganza Eguiarte [123].

νοσυρμάτων. Στο σχήμα Σχ. 4.4 απεικονίζεται η γωνιακή εξάρτηση του συνεκτικού πεδίου  $H_c$  για τα συστήματα τύπου I. Παρατηρείται συστηματική αύξηση του  $H_c$ , που υποδηλώνει σχηματισμό και διάδοση μαγνητικών δινών [124, 117].

Για να δοθεί ολοκληρωμένη ερμηνεία του φαινομένου και να γίνει κατανοητή η διαφορετική υστέρηση των δυο τριμηματικών νανοσυρμάτων πραγματοποιήθηκαν μικρομαγνητικοί υπολογισμοί και προσομοιώθηκε η αντιστροφή της μαγνήτισης. Τα νανوسύρματα τύπου I και II βρέθηκαν αρχικά στην κατάσταση θετικής μαγνήτισης ( $M = +M_s$ ). Στη συνέχεια, πραγματοποιήθηκε εφαρμογή αντιστρέφοντος πεδίου ( $H \sim -H_c$ ) παράλληλα στον μεγάλο άξονα του κυλίνδρου (z-άξονα). Η προσομοίωση αυτή είναι ικανοποιητική καθώς πειραματικά, ο ρυθμός μεταβολής του πεδίου είναι αρκετά μικρός συγκριτικά με την κίνηση των μαγνητικών τοιχωμάτων και επομένως το πεδίο μπορεί να θεωρηθεί σταθερό.

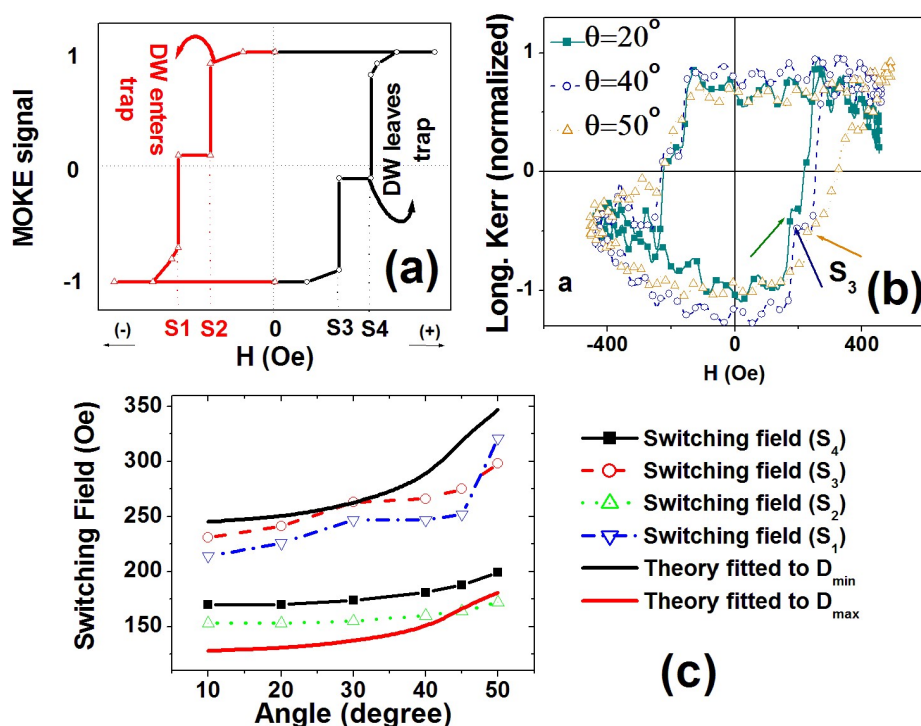
Στην εικόνα Σχ. 4.5(a,b) απεικονίζονται στιγμιότυπα της χρονικής εξέλιξης του



Σχήμα 4.3: Συνεκτικό πεδίο  $H_c/J$  ομοιόμορφων σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων διαφορετικής διαμέτρου  $D$  συναρτήσει του μήκους τους  $L/a$ . Τα νανოსύρματα μικρότερης διαμέτρου παρουσιάζουν συστηματικά μεγαλύτερο συνεκτικό πεδίο.

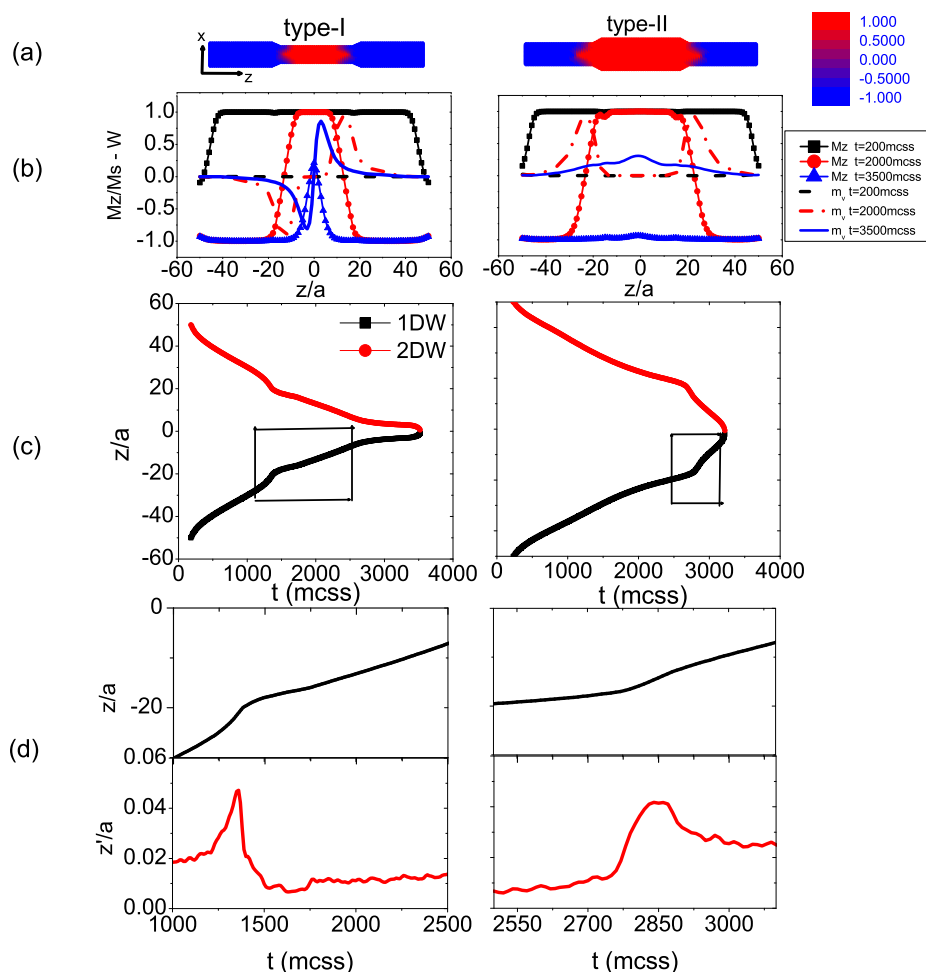
προφίλ της μαγνήτισης των νανοσυρμάτων τύπου I και II και του στροβιλισμού, κατά την ανταπόκριση των νανοσυρμάτων σε εξωτερικό πεδίο  $H > H_c$ , σε τρεις χαρακτηριστικές χρονικές στιγμές, τη στιγμή του σχηματισμού, τη στιγμή που τα τοιχώματα προσεγγίζουν τη διεπαφή αλλά και τη στιγμή που το φαινόμενο ολοκληρώνεται. Ο στροβιλισμός υπολογίζεται μέσω της σχέσης Εξ. 1.72. Αξίζει να σημειωθεί πως ο σχηματισμός των δινών είναι σε συμφωνία με τις πειραματικές παρατηρήσεις της γωνιακής εξάρτησης του συνεκτικού πεδίου των τριμηματικών νανοσυρμάτων.

Στην εικόνα Σχ. 4.5(c), απεικονίζεται η χρονική εξέλιξη της θέσης του κέντρου των μαγνητικών δινών. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον προκαλεί, η αλλαγή της κλίσης της καμπύλης, δηλαδή της ταχύτητας, όταν οι μαγνητικές δίνες προσεγγίσουν τη διεπαφή ( $z = 17a$  έως  $z = 21a$ ). Εστιάζουμε περισσότερο σε αυτό το σημείο και στην εικόνα Σχ. 4.5(d) σχεδιάζουμε την ταχύτητα των μαγνητικών δινών συναρτήσει του χρόνου. Παρατηρείται και στους δυο τύπους των νανοσυρμάτων μια αρχική απότομη αύξηση της ταχύτητας. Η αύξηση αυτή οφείλεται στο γεγονός πως περιφερειακά στη διεπαφή οι μαγνητικές ροπές είναι "ελεύθερες", δηλαδή, δεν έχουν



Σχήμα 4.4: (a) Σχηματική απεικόνιση των βρόχων υστέρησης του συστήματος τύπου I. (b) Πειραματικοί MOKE βρόχοι υστέρησης σε  $\theta = 0^\circ$ ,  $40^\circ$  και  $50^\circ$  για νανοσύρματα τύπου I. (c) Γωνιακή εξάρτηση του συνεκτικού πεδίου  $H_c$  του συστήματος τύπου I και σύγκριση με θεωρητικά αποτελέσματα αναλυτικού μοντέλου Stoner-Wohlfarth. Οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν από τους Seyed-Majid Peighambari-Sattari, Cristina Bran, Ester M Palmero και Eider Berganza Eguiarte [123].

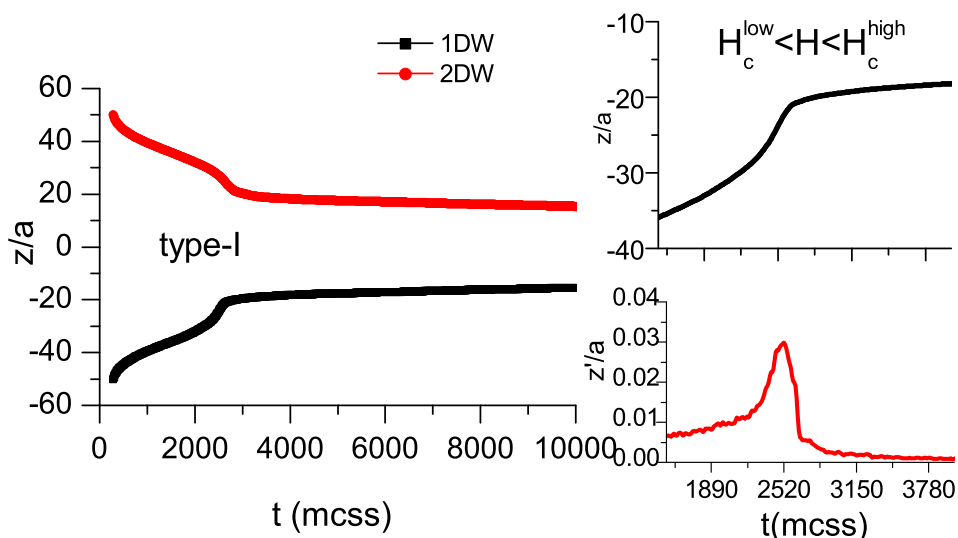
γειτονικές ροπές και επομένως αυτό οδηγεί στη μείωση του τοπικού πεδίο ανταλλαγής. Αμέσως μετά την έξοδο των μαγνητικών δινών από τη διεπαφή, παρατηρείται σημαντική ελάττωση της ταχύτητας διάδοσης στα νανοσύρματα τύπου I, ενώ αντίθετη συμπεριφορά παρατηρείται στα συστήματα τύπου II. Το φαινόμενο αυτό οφείλεται ακριβώς στη μεταβολή της μαγνητικής ανισοτροπίας που εμφανίζεται εξαιτίας του διαφορετικού πάχους της κάθε περιοχής. Αυτό σημαίνει πως στα συστήματα τύπου II, όπου τα λεπτά τμήματα είναι στα άκρα, απαιτείται ένα ισχυρό πεδίο για να γίνει η πυρήνωση των μαγνητικών δινών ενώ καθώς αυτές εξέρχονται από τη διεπαφή εισέρχονται σε "μαλακότερο" μαγνητικό περιβάλλον κάτι που οδηγεί στην επιτάχυνσή τους. Αντίθετα, στα συστήματα τύπου I, η πυρήνωση πραγματοποιείται στο "χαλαρό" μαγνητικό περιβάλλον του τριτομηματικού σύρματος και στη συνέχεια οι δίνες οδηγούνται λόγω του πεδίου σε "σκληρότερο" περιβάλλον. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την επιβράδυνσή τους στο ενδιάμεσο τμήμα του σύρμα-



Σχήμα 4.5: (a) Αξονική κατανομή μαγνήτισης των συστημάτων τύπου I και II όταν τα μαγνητικά τοιχώματα προσεγγίζουν την διεπαφή. Ο χρωματικός κώδικας υποδεικνύει την κατεύθυνση των μαγνητικών ροπών. Συγκεκριμένα, το κόκκινο υποδηλώνει πως οι μαγνητικές ροπές στρέφονται "πάνω" και το μπλε "κάτω". (b) Στιγμιότυπα του προφίλ της μαγνήτισης ( $M_z/M_s$  συναρτήσε της θέσης  $z/a$ , συνεχείς γραμμές) και του στροβιλισμού της ( $m_v$  συναρτήσε της θέσης  $z/a$ , διακεκομμένες γραμμές) κατά μήκος του  $z$ -άξονα σε διαφορετικές χρονικές στιγμές. (c) Θέση  $z/a$  του κέντρου των μαγνητικών τοιχωμάτων συναρτήσε του χρόνου. (d) Θέση  $z/a$  και ταχύτητα  $z'/a$  του (αριστερού) μαγνητικού τοιχώματος στη διεπαφή [123].

τος [123]. Το αποτέλεσμα αυτό είναι σε συμφωνία με τα μακροσκοπικά αποτελέσματα των βρόχων υστέρησης όπου το "γόνατο" εμφανίζεται μόνο στο σύστημα τύπου I Σχ. 4.2. Αυτό συμβαίνει καθώς η πυρήνωση των τοιχωμάτων λαμβάνει χώρα σε μικρότερο πεδίο από αυτό που είναι ικανό να οδηγήσει σε διέλευση των τοιχωμάτων στο ενδιάμεσο τμήμα του σύρματος. Αντίθετα στα συστήματα τύπου II η πυρήνωση πραγματοποιείται στα στενά τμήματα που έχουν μεγαλύτερο πεδίο αντιστροφής συγκριτικά με το ενδιάμεσο τμήμα. Είναι εύκολο τώρα να γίνει κατα-

νοητό πώς, αν στα συστήματα τύπου I το εξωτερικό πεδίο βρίσκεται στην περιοχή τιμών  $H_c^{low} < H < H_c^{high}$ , τότε οι μαγνητικές δίνες θα παγιδευτούν στη διεπαφή και δεν θα μπορούν να εξέλθουν από αυτή [123]. Το φαινόμενο της παγίδευσης των μαγνητικών δινών στα νανosuρματα τύπου I, απεικονίζεται στο Σχ. 4.6 όπου η ταχύτητα των μαγνητικών τοιχωμάτων μετά τη διεπαφή έχει μηδενιστεί.



Σχήμα 4.6: Θέση  $z/a$  και ταχύτητα  $z'/a$  του των μαγνητικών δινών συναρτήσει του χρόνου σε νανosuρμα τύπου I υπό την επίδραση εξωτερικού πεδίου  $H$  για το οποίο ισχύει  $H_c^{low} < H < H_c^{high}$ . Η ταχύτητα των μαγνητικών δινών μηδενίζεται στη διεπαφή [123].

## 4.4 Συμπεράσματα

Πραγματοποιήθηκε μελέτη δυο χαρακτηριστικών περιπτώσεων τριμηματικών νανosuρμάτων στα οποία δύναται να σχηματιστούν μαγνητικές δίνες κατά την εφαρμογή αντιστρέφοντος πεδίου. Στην πρώτη περίπτωση τα άκρα του συστήματος διαθέτουν μεγαλύτερη διάμετρο συγκριτικά με την ενδιάμεση περιοχή (τύπος I) ενώ στη δεύτερη περίπτωση συμβαίνει ακριβώς το αντίθετο (τύπος II). Καθώς οι μαγνητικές δίνες διέρχονται στις περιοχές διαφορετικής μαγνητικής ανισοτροπίας, η ταχύτητα τους μεταβάλλεται. Το φαινόμενο αποτυπώνεται και στο βρόχο υστέρησης των συστημάτων τύπου I με τη μορφή ενός γόνατου και στις δυο πλευρές του βρόχου. Τέλος, τα συστήματα τύπου I μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως "παγίδες" των μαγνητικών τοιχωμάτων όταν το εξωτερικό πεδίο είναι συγκρίσιμο με το συνεκτικό πεδίο του συστήματος [123]. Η ιδιότητα τους αυτή παρέχει τη δυνα-

τότητα ελεγχόμενου σχηματισμού και διάδοσης μαγνητικών δινών και τα καθιστά κατάλληλα συστήματα για την κατασκευή σπιντρονικών διατάξεων.

# Κεφάλαιο 5

## Μαγνητικά σκυρμιόνια σε καμπυλωμένες νανοδομές

### 5.1 Εισαγωγή

Τα μαγνητικά σκυρμιόνια είναι τοπολογικά εντοπισμένες μαγνητικές διαμορφώσεις περιστροφικής γεωμετρίας [37]. Παρατηρήθηκαν πρόσφατα, σε μη κεντροσυμμετρικούς κρυστάλλους [126, 127, 142] και σε λεπτά σιδηρομαγνητικά υμένα συζευγμένα σε υπόβαθρο βαρέος μετάλλου [129, 130], που εμφανίζουν αλληλεπιδράσεις Dzyaloshinskii-Moriya (DM) [8, 9].

Το τοπολογικά και γεωμετρικά τους χαρακτηριστικά τα καθιστούν υποψήφια για την κατασκευή διατάξεων μαγνητικής αποθήκευσης [39]. Ακόμα, η εύκολη μετακίνηση των σκυρμιονίων μέσω πλευρικού spin ρεύματος [39, 40, 23], συγκριτικά με άλλες σολιτονικές μαγνητικές διαμορφώσεις όπως τα μαγνητικά τοιχώματα [130], επιτρέπει την κατασκευή σπιντρονικών διατάξεων μονοδρομικής μνήμης [21] χαμηλής ενεργειακής κατανάλωσης [39].

Ωστόσο, υπάρχουν συγκεκριμένα εμπόδια που πρέπει να αντιμετωπιστούν μέχρι την τελική υλοποίηση τέτοιων διατάξεων. Πιο συγκεκριμένα, κατά την εφαρμογή spin ρεύματος για την μετακίνηση των σκυρμιονίων ασκείται πάνω τους δύναμη Magnus μαγνητικής φύσεως [41, 42], που τα αναγκάζει να παρεκκλίνουν προς τα πλευρικά όρια των νανολωρίδων με τελικό αποτέλεσμα την καταστροφή τους. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται σκυρμιονικό φαινόμενο Hall (SkHE) και οδηγεί στην απώλεια της αποθηκευμένης πληροφορίας.

Ένας τρόπος περιορισμού του SkHE είναι η μεταφορά των σκυρμιονίων να

πραγματοποιηθεί μέσω κυμάτων spin [131, 132]. Τα σκυρμιόνια μετατοπίζονται μέσω μαγνονίων που προκύπτουν από διαβάθμιση της θερμοκρασίας σε τοπολογικούς μονωτές στους οποίους παρατηρούνται φαινόμενα σιδηρομαγνητικής τάξης [133]. Οι αποκλίσεις που προκαλούνται από το SkHE εξαφανίζονται τελείως σε μαγνόνια υψηλής ενέργειας [134]. Παρόλα αυτά, είναι αρκετά δύσκολη η εφαρμογή κυμάτων spin σε νανολωρίδες λόγω των ιδιαίτερα μικρών τους διαστάσεων και η μέθοδος της μετακίνησης μέσω spin πολωμένου ρεύματος παραμένει η επικρατέστερη.

Για να αντιμετωπιστούν οι αρνητικές συνέπειες του SkHE προτείνεται ο χωρικός περιορισμός τους στο κέντρο των νανολωρίδων μέσω ενεργειακών φραγμών [135, 136, 137, 138, 139]. Οι ενεργειακοί φραγμοί που προτείνονται είναι διαφορετικής φυσικής προέλευσης αλλά οδηγούν στο ίδιο τελικό αποτέλεσμα. Η πιο συνηθισμένη φυσική μέθοδος δημιουργίας ενός τέτοιου φραγμού είναι η κατάλληλη διαμόρφωση της κάθετης [139] ή της κρυσταλλικής μαγνητικής ανισοτροπίας [138] με σκοπό τη δημιουργία ενός μονοπατιού χαμηλής αντίστασης, γύρω από περιβάλλον υψηλής αντίστασης, που εξαναγκάζει τα σκυρμιόνια να διατηρήσουν ευθύγραμμη κίνηση. Μια άλλη μέθοδος είναι η δημιουργία ορθογώνιων ραβδώσεων στα άκρα της νανολωρίδας διαμορφώνοντας το ύψος των σιδηρομαγνητικών στρωμάτων. Η εγκάρσια διαμόρφωση πάχους που δημιουργείται εξαναγκάζει τα σκυρμιόνια να παραμείνουν στο κέντρο του συστήματος στο οποίο διαδίδονται [137].

Ένας ακόμα παράγοντας που δυσκολεύει την τεχνολογική αξιοποίηση των σκυρμιονίων είναι ο ανεξέλεγκτος σχηματισμός τους στα άκρα των μαγνητικών υμενίων και των νανολωρίδων [52]. Το φαινόμενο αυτό, που αναφέρεται στη βιβλιογραφία ως "edge effect", οδηγεί σε λανθασμένη αποθήκευση πληροφορίας. Επίσης, τα άκρα αυτών των συστημάτων επηρεάζουν, πέρα από το σχηματισμό, και τις ταλαντωτικές και περιστροφικές κινήσεις των σκυρμιονίων [140, 141]. Από τα παραπάνω διαφαίνεται ότι ο ρόλος των ελεύθερων ορίων των νανολωρίδων είναι καθοριστικός στη προσπάθεια τεχνολογικής αξιοποίησης των μαγνητικών σκυρμιονίων σε διατάξεις τρισδιάστατης μνήμης.

Στους χαμηλοδιάστατους ελικομαγνήτες (B20) παρατηρήθηκε διεύρυνση της σκυρμιονικής περιοχής του διαγράμματος φάσης [142, 143, 144], εξαιτίας του χωρικού περιορισμού (confinement) των σκυρμιονίων. Ακόμα, οι Keesman *et al* [144] παρατήρησαν σχηματισμό σκυρμιονίων σε θερμοκρασία δωματίου, ενώ έδειξαν θεωρητικά ότι σε χωρικά εντοπισμένες γεωμετρίες (confined geometries) ο σχη-



ματισμός των σκυρμιονίων ευνοείται περισσότερο έναντι εκείνου των σπειρών, σε σύγκριση με "άπειρες" γεωμετρίες. Αντίστοιχα αποτελέσματα παρέχονται και από τους Rybakov *et al* [145]. Τέλος, σχηματισμός μαγνητικών σκυρμιονίων σε μηδενικό εξωτερικό πεδίο παρατηρήθηκε πειραματικά σε γεωμετρικά περιορισμένες διατάξεις [146].

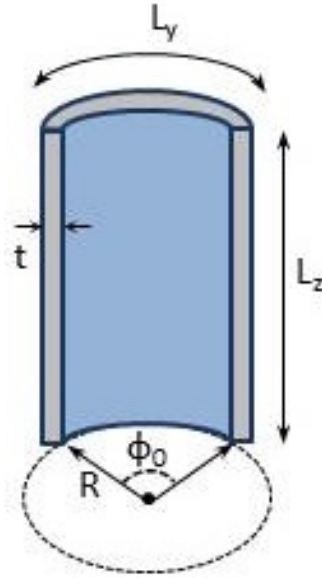
Παράλληλα, οι μαγνητικές ιδιότητες των σολιτονικών διαμορφώσεων σε καμπυλωμένες επιφάνειες προσελκύουν το ερευνητικό ενδιαφέρον καθώς η καμπυλότητα διαμορφώνει τις φυσικές ιδιότητες του συστήματος [51]. Η καμπυλωμένη γεωμετρία των νανοσυρμάτων και των λυγισμένων επιφανειών [147, 148, 149] προκαλεί χειρόμορφες αλληλεπιδράσεις όπως μαγνητική ανισοτροπία και αλληλεπιδράσεις Dzialoshinskii–Moriya.

Παρά το γεγονός ότι η επίδραση της καμπυλότητας στις μαγνητικές ιδιότητες έχει μελετηθεί σε αρκετές εργασίες [147, 150, 151, 152], ο σχηματισμός μαγνητικών σκυρμιονίων σε καμπυλωμένες επιφάνειες παρουσία DM αλληλεπιδράσεων παραμένει ανεξερεύνητος. Στο κεφάλαιο αυτό, μελετάται η επίδραση της καμπυλότητας στο σχηματισμό των μαγνητικών σκυρμιονίων. Η μελέτη επικεντρώνεται κυρίως σε ανοικτές κυλινδρικές επιφάνειες και νανοσωλήνες. Το κυλινδρικό τους σχήμα διαθέτει αρκετά χαρακτηριστικά που ευνοούν το σχηματισμό και τη διάδοση των μαγνητικών σκυρμιονίων ενώ, η απουσία ελεύθερων πλευρικών ορίων στην περίπτωση των νανοσωλήνων αποτελεί μια εν δυνάμει προοπτική αποφυγής του σκυρμιονικού φαινομένου Hall και της καταστροφής τους [60, 61, 62, 63].

## 5.2 Μοντελοποίηση και μέθοδος προσομοίωσης

Πραγματοποιείται μοντελοποίηση λεπτών σιδηρομαγνητικών κυλινδρικών νανοδομών, κατά μήκος του  $z$  άξονα, μήκους  $L_z$ , πλάτους  $L_y$ , εσωτερικής ακτίνας  $R$  και πάχους  $t \ll R$  (Σχ. 5.1). Η κεντρική γωνία των καμπυλωμένων νανολωρίδων ορίζεται ως  $\phi_o = L_y/R$ . Επομένως, η οριακή περίπτωση των κυλινδρικών νανοσωλήνων ακτίνας  $R$  προκύπτει για  $\phi_o = 2\pi$ , ενώ η επίπεδη νανολωρίδα για  $R \rightarrow \infty$  και  $\phi_o = 0$ . Ο αριθμός των "ατομικών" θέσεων και το μέγεθος του συστήματος παραμένουν σταθερά κατά την καμπύλωση [60, 61, 62, 63].

Για να πραγματοποιηθούν οι αριθμητικοί υπολογισμοί και η προσομοίωση της θεμελιώδους μαγνητικής κατάστασης η έκφραση της Εξ.2.1 διακριτοποιείται, σύμφωνα με τη γνωστή μέθοδο (Ενότητα / 2.1), χρησιμοποιώντας κυλινδρικό πλέγμα κόκκων διαστάσεων  $\alpha \times \alpha \times \alpha$ , κατά μήκος της ακτινικής, αζιμουθιακής και  $z$  διεύ-



Σχήμα 5.1: Κυλινδρική νανολωρίδα πλάτους  $L_y$ , πάχους  $t$ , ακτίνας καμπυλότητας  $R$  και γωνίας καμπύλωσης  $\phi_0$  ανεπτυγμένη κατά μήκος του  $z$  άξονα [60, 61, 62, 63].

θυνσης αντίστοιχα (Σχ.5.1). Για λόγους απλότητας, η διακριτοποίηση της κεντρικής γωνίας  $\phi_0$  πραγματοποιείται με σταθερό βήμα  $\delta\phi = \alpha/R$ . Το πάχος της νανοδομής επιλέγεται ίσο με έναν κόκκο ( $t = \alpha$ ), επομένως οι διακυμάνσεις της μαγνήτισης κατά την ακτινική διεύθυνση δεν λαμβάνονται υπόψη.

Η πλεγματική μορφή της ολικής ενέργειας εκφράζεται με τη μορφή αθροίσματος των συνεισφορών της ενέργειας του κάθε κόκκου,  $E = \sum_i E_i$ , με

$$E_i = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle j \rangle} \hat{m}_i \cdot \hat{m}_j - \frac{1}{2}D \sum_{\langle j \rangle} \hat{m}_j \times \hat{D}_{ij} - K(\hat{m}_i \cdot \hat{e}_{n,i})^2 - H\hat{m}_i \cdot \hat{h}_i. \quad (5.1)$$

όπου  $\hat{m}_i$  είναι το μοναδιαίο διάνυσμα κατά τη διεύθυνση της μαγνητικής ροπής του κόκκου  $i$ . Το διάνυσμα των αλληλεπιδράσεων DM παίρνει τη μορφή

$$\hat{D}_{ij} = \hat{e}_{\rho,i} \times \hat{r}_{ij},$$

,που αποτελεί γενίκευση της μορφής  $\hat{D}_{ij} = \hat{x} \times \hat{r}_{ij}$  που περιγράφει τη σύζευξη DM σε επίπεδες  $y - z$  διεπιφάνειες [153, 154]. Αξίζει να σημειωθεί πως, η βασική φυσική διαφορά συγκριτικά με τις επίπεδες διεπιφάνειες είναι ότι για τις κα-

μπυλωμένες το διάνυσμα  $\widehat{D}_{ij}$  είναι εξαρτημένο από τη θέση εξαιτίας της μεταβολής της ακτινικής διεύθυνσης της επιφάνειας. Οι διπολικές αλληλεπιδράσεις δεν λαμβάνονται υπόψη στους υπολογισμούς, καθώς σε μια προσέγγιση μέσου πεδίου, μπορούν να αντιμετωπιστούν ως ένας ακόμα όρος μονοαξονικής ανισοτροπίας κατά μήκος του z άξονα που οδηγεί σε ελάττωση της ακτινικής ανισοτροπίας ( $K'_u = K_u - 4\pi M_s^2$ ). Τέλος, το εφαρμοζόμενο εξωτερικό πεδίο επιλέγεται είτε ομογενές κατά μήκος του x άξονα ( $\widehat{h}_i = \widehat{x}$ ) είτε ακτινικό ( $\widehat{h}_i = \widehat{e}_{n,i}$ ), όπως αναφέρεται και στη συνέχεια.

Οι ενεργειακές παράμετροι σε λεπτά κυλινδρικά συστήματα που εισάγονται στην Εξ.5.1 σχετίζονται με τις μικρομαγνητικές ενεργειακές παραμέτρους μέσω των γνωστών σχέσεων  $J = 2A\alpha$ ,  $D = d\alpha^2$ ,  $K = K_u\alpha^3$  και  $H = M_s B\alpha^3$ .

Χρησιμοποιούνται τυπικές παράμετροι για την περιγραφή μετάλλων μετάβασης σε υπόστρωμα βαρέος μετάλλου [153, 155],  $A = 10pJ/m$ ,  $K_u = 500mJ/m^3$ ,  $M_s = 580kA/m$ ,  $d = 4mJ/m^2$  ενώ το μέγεθος της πλευράς κάθε κόκκου είναι  $\alpha = 2nm$ , αρκετά μικρότερο, δηλαδή, από το μήκος συσχέτισης των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής  $l_{ex} = \sqrt{2A/\mu_0 M_s^2} \sim 7nm$ . Το εξωτερικό πεδίο επιλέγεται  $H = 0.9T$ . Τελικά, η θεμελιώδης ενεργειακή κατάσταση προσδιορίζεται από τις αδιαβάθμητες ενεργειακές παραμέτρους ( $J = 1$ )  $D/J = 0.4$ ,  $K/J = 0.1$  και  $H/J = 0.1$ .

Επίσης, το βήμα της έλικας της ελικοειδούς φάσης μηδενικής ανισοτροπίας ( $K=0$ ) καθορίζεται από την παράμετρο  $D/J$  μέσω της σχέσης [144],

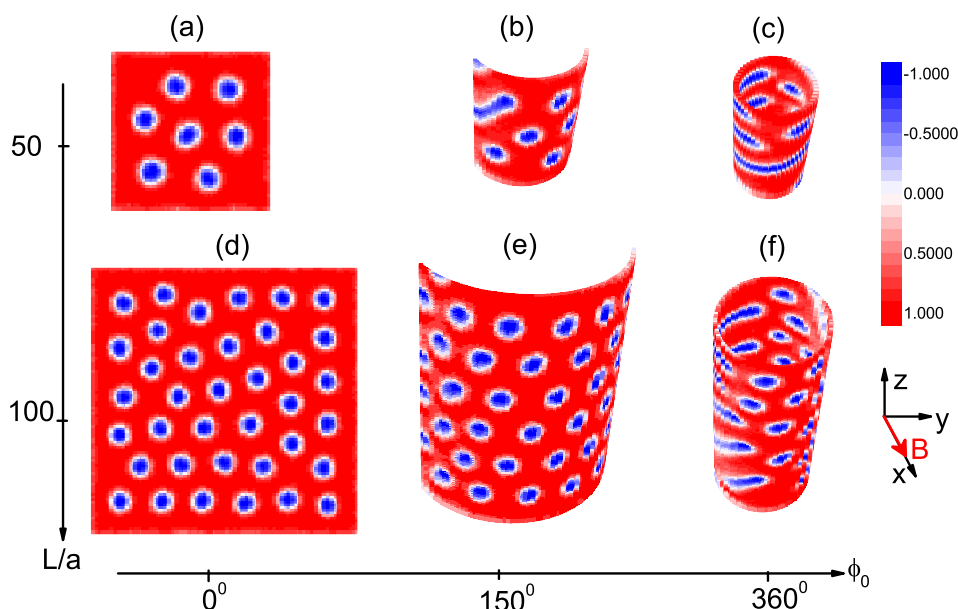
$$p = \frac{2\pi a}{\tan^{-1}(D/J)}. \quad (5.2)$$

Για τις παραμέτρους που αναφέρονται παραπάνω προκύπτει  $p \simeq 16.5a$ . Το μέγεθος αυτό αποτελεί ενδεικτικό μήκος της σκυρμιονικής φάσης αφού είναι περίπου ίσο με την ακτίνα των σκυρμιονίων.

Προσομοιώνεται η διαδικασία ψύξης υπό πεδίο μεταξύ των θερμοκρασιών  $T_H = 2.00/J$  και  $T_L = 0.01/J$  με βήμα  $dT/T = 0.05$ , ενώ το πεδίο παραμένει σταθερό  $H_{cool} = 0.1/J$ . Τα αποτελέσματα προκύπτουν από μέσους όρους 30 – 50 ανεξάρτητων ακολουθιών εφησυχασμού.

## 5.3 Αριθμητικά αποτελέσματα

### 5.3.1 Σκυρμιονική φάση και καμπυλότητα



Σχήμα 5.2: Σχηματισμός μαγνητικών σκυρμιονίων σε νανοδομές διαφορετικής καμπυλότητας μετά την εφαρμογή διαδικασίας ψύξης υπό σταθερό ομογενές πεδίο κατά μήκος του  $x$  άξονα. Οι κυλινδρικές επιφάνειες προκύπτουν από τη σταδιακή καμπύλωση των επίπεδων συστημάτων ( $L_y = L_z \equiv L$ ) γύρω από τον άξονα  $z$ . Ο χρωματικός κώδικας των μαγνητικών διαμορφώσεων προκύπτει από τις τιμές της μαγνήτισης κατά μήκος του άξονα εφαρμογής του πεδίου ( $x$  άξονας). (a), (d) Επίπεδα συστήματα, (b)  $L = 50a, \phi_0 = 150^\circ, R = 19.1a$ , (c)  $L = 50a, \phi_0 = 360^\circ, R = 8.0a$ , (e)  $L = 100a, \phi_0 = 150^\circ, R = 38.2a$ , και (f)  $L = 100a, \phi_0 = 360^\circ, R = 15.9a$ , με  $a = 2nm$ . Αυξανόμενη της γωνίας καμπύλωσης ( $\phi_0$ ), η σκυρμιονική φάση μετατρέπεται είτε σε σπειροειδή φάση (c) είτε σε υβριδική σκυρμιονική / σπειροειδή φάση (f), ανάλογα με την τιμή της ακτίνας καμπυλότητας  $R$  [60, 61, 62, 63].

Μελετάται ο σχηματισμός μαγνητικών σκυρμιονίων σε καμπυλωμένες μαγνητικές νανοδομές και νανοσωλήνες. Εφαρμόζεται διαδικασία ψύξης υπό σταθερό ομογενές μαγνητικό πεδίο κάθετο στην επιφάνεια των νανοδομών (κατά μήκος δηλαδή του  $x$ -άξονα). Οι υπολογισμοί επαναλαμβάνονται σε συστήματα διαφορετικής καμπυλότητας. Μετά τη λήξη της διαδικασίας ψύξης υπό πεδίο, παρατηρείται ο σχηματισμός των σκυρμιονίων.

Στο σχήμα Σχ. 5.2, απεικονίζονται τρεις χαρακτηριστικές περιπτώσεις νανοδομών, το επίπεδο σύστημα (ΕΣ), ένα καμπυλωμένο σύστημα γωνίας καμπύλωσης  $\phi = 150$  μοιρών (ΚΣ) και ένας νανοσωλήνας (ΝΣ). Οι υπολογισμοί επαναλαμβάνονται για συστήματα διαφορετικού μεγέθους. Στα επίπεδα συστήματα παρατηρεί-

ται ο γνωστός σχηματισμός σκυρμιονίων [156]. Συγκεκριμένα, το περιβάλλον των σκυρμιονίων είναι σιδηρομαγνητικό, όλες οι μαγνητικές ροπές διατάσσονται κατά τη φορά του εξωτερικού πεδίου, ενώ στο κέντρο των σκυρμιονίων διατάσσονται αντιπαράλληλα. Ενδιαμέσως, παρατηρείται μια ομαλή μετάβαση από την "πάνω" κατάσταση ( $M_x = 1$ ) στην "κάτω" κατάσταση ( $M_x = -1$ ). Ακόμα, είναι εύκολα διακριτό πως ο αριθμός των σκυρμιονίων αυξάνεται με το μέγεθος του συστήματος [60, 61, 62, 63].

Καθώς οι νανοδομές καμπυλώνονται παρατηρείται πως τα σκυρμιόνια που βρίσκονται στα άκρα των επίπεδων συστημάτων μετατρέπονται σταδιακά σε σπείρες και χάνουν τα τοπολογικά τους χαρακτηριστικά. Το φαινόμενο εμφανίζεται ενισχυμένο στους νανοσωλήνες όπου ο σχηματισμός των σκυρμιονίων είναι επιτρεπτός μόνο στη ράχη του κυλίνδρου, στην περιοχή δηλαδή που το εξωτερικό πεδίο παραμένει κάθετο. Παραπλεύρως της ράχης του κυλίνδρου, όπου το πεδίο είναι παράλληλο, τα σκυρμιόνια μετατρέπονται σε σπείρες. Σε λεπτούς νανοσωλήνες ο σχηματισμός των σπειρών είναι καθολικός και δεν σχηματίζονται σκυρμιόνια. Το φαινόμενο αυτό αναδεικνύει μια ισχυρή συσχέτιση του σχηματισμού των σκυρμιονίων με τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των νανοδομών και τη διεύθυνση του εξωτερικού πεδίου [60, 61, 62, 63]. Τα αποτελέσματα συνοψίζονται στον πίνακα Π. 5.1.

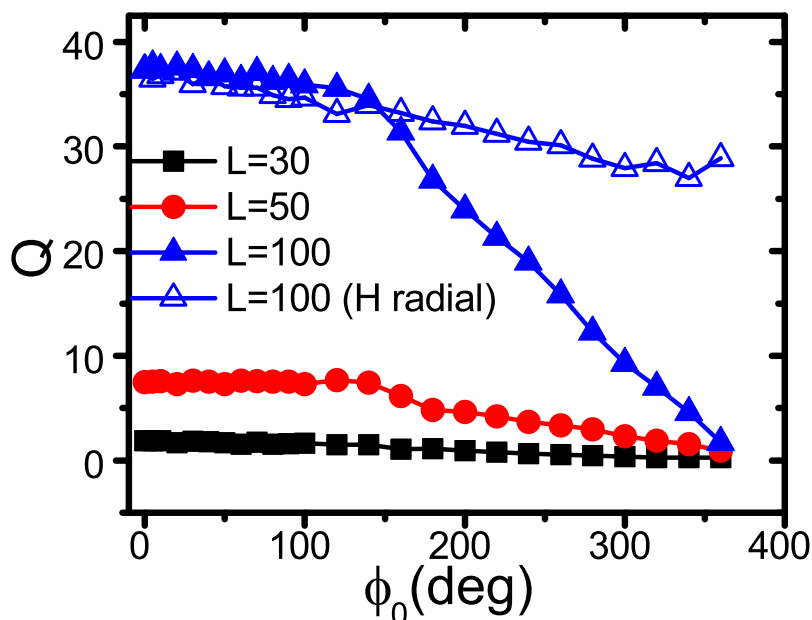
Για να εκτιμηθεί η επίδραση της καμπυλότητας στη σκυρμιονική φάση, υπολογίζεται το τοπολογικό φορτίο ( $Q$ ) [23, 154, 157]

$$Q = \frac{1}{4\pi} \iint d\phi dz m \cdot \left( \frac{\partial m}{\partial \phi} \times \frac{\partial m}{\partial z} \right). \quad (5.3)$$

Η μέθοδος υπολογισμού του τοπολογικού φορτίου αναφέρεται στο Παράρτημα / Α'3.

Το σκυρμιόνιο έχει τοπολογικό φορτίο  $Q = \pm 1$ , ενώ το πρόσημο εξαρτάται από τη φορά του πεδίου. Επομένως, η απόλυτη τιμή του τοπολογικού φορτίου  $Q$  στο επίπεδο σύστημα ισούται με τον αριθμό των σκυρμιονίων που σχηματίζονται.

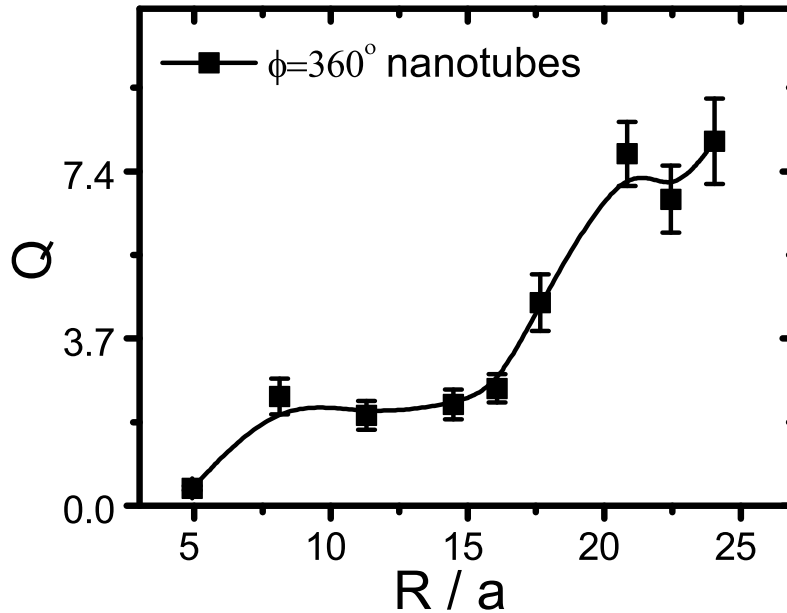
Η εξάρτηση του τοπολογικού φορτίου  $Q$  από τη γωνία καμπύλωσης  $\phi_0$  απεικονίζεται στο Σχ. 5.3. Παρατηρείται μια ομαλή ελάττωση του  $Q$ , από την αρχική τιμή που προκύπτει στα επίπεδα συστήματα, καθώς η καμπυλότητα των νανοδομών αυξάνεται. Ακόμα, εφαρμόζοντας ακτινικό πεδίο ψύξης, παρατηρείται πολύ μικρότερη μεταβολή του τοπολογικού φορτίου, αντίστοιχα και του αριθμού των σκυρμιονίων, με τη γωνία  $\phi_0$  ( $L=100$  H radial). Το τελευταίο αποτέλεσμα ενισχύει



Σχήμα 5.3: Εξάρτηση του τοπολογικού φορτίου ( $Q$ ) από το μέγεθος και τη γωνία καμπύλωσης ( $\phi_0$ ) μαγνητικών νανοδομών κατά την ανταπόκρισή τους σε διαδικασία ψύξης υπό σταθερό ομογενές εξωτερικό πεδίο [60, 61, 62, 63].

το συμπέρασμα πως η διεύθυνση του εξωτερικού πεδίου είναι καθοριστική για το σχηματισμό των σκυρμιονίων [60, 61, 62, 63].

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η σταθεροποίηση σκυρμιονίων σε μαγνητικούς νανοσωλήνες. Στο Σχ. 5.4 υπολογίζεται το τοπολογικό φορτίο  $Q$  συναρτήσει της ακτίνας των νανοσωλήνων. Με αυτό τον τρόπο μπορεί να οριοθετηθεί η μετάβαση από την κατάσταση των σπειρών στο σχηματισμό των σκυρμιονίων. Το μήκος των νανοσωλήνων διατηρείται σταθερό ( $L_z = 220a$ ) έτσι ώστε το αποτέλεσμα να εξαρτάται μόνο από την ακτίνα του συστήματος. Παρατηρείται πως σε νανοσωλήνες μικρής ακτίνας το τοπολογικό φορτίο είναι μικρό (σχηματισμός σπειρών). Καθώς η ακτίνα μεγαλώνει παρατηρείται αρχικά μια πολύ μικρή αύξηση, ενώ απότομα σε ακτίνα  $R \sim 14a$  παρατηρείται μεταβολή της κλίσης της καμπύλης, δηλαδή, πιο απότομη αύξηση του τοπολογικού φορτίου  $Q$ . Το αποτέλεσμα αυτό σηματοδοτεί το σχηματισμό σκυρμιονίων και η σκυρμιονική φάση σε αυτά τα συστήματα αποτελείται τόσο από σπείρες όσο και από σκυρμιόνια (υβριδική κατάσταση) [60, 61, 62, 63]. Ο σχηματισμός των σκυρμιονίων καθορίζεται, λοιπόν, από την ακτίνα των νανοσωλήνων. Στην επόμενη ενότητα θα υπολογιστεί η



Σχήμα 5.4: Εξάρτηση του τοπολογικού φορτίου ( $Q$ ) από την ακτίνα ( $R/a$ ) μαγνητικών νανοσωλήνων ίδιου μήκους κατά την ανταπόκρισή τους σε διαδικασία ψύξης υπό σταθερό ομογενές εξωτερικό πεδίο [60, 61, 62, 63].

ακτίνα στην οποία λαμβάνει χώρα αυτή η μετάβαση.

### 5.3.2 Μελέτη μεγέθους και σχήματος μαγνητικών σκυρμιονίων

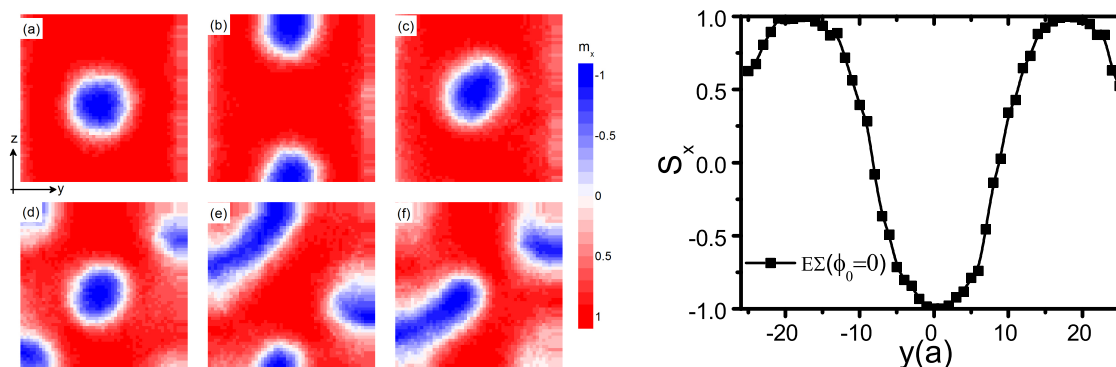
Στην προηγούμενη ενότητα, παρατηρήθηκε πως η καμπυλότητα καθορίζει τον αριθμό των σκυρμιονίων που σχηματίζονται σε καμπυλόγραμμες μαγνητικές νανοδομές και νανοσωλήνες. Για την λεπτομερέστερη κατανόηση του φαινομένου αλλάζουμε τη διακριτοποίηση της προσομοίωσης μεταβάλλοντας τις ενεργειακές παραμέτρους της Εξ. 5.1, με έναν τέτοιο τρόπο ώστε το βήμα της έλικας (Εξ. 5.2) των σκυρμιονίων να είναι συγκρίσιμο με το μέγεθος του συστήματος [144]. Με αυτό τον τρόπο ο σχηματισμός μόνο ενός σκυρμιονίου είναι ενεργειακά επιτρεπτός. Το σκυρμιόνιο αποτελείται σε αυτή την περίπτωση από μεγαλύτερο αριθμό μαγνητικών ροπών και οι διαφοροποιήσεις που εισάγονται λόγω της καμπύλωσης στο σχήμα και το μέγεθος του είναι πιο εύκολα διακριτές. Πρέπει να αναφερθεί πως η μεταβολή αυτή των παραμέτρων δεν αλλάζει τις φυσικές ιδιότητες του συστήματος. Η μεταβολή των παραμέτρων συνοψίζεται στον πίνακα Π. 5.2.

Στην εικόνα Σχ. 5.5 απεικονίζεται ο σχηματισμός σκυρμιονίου σε συστήματα

Πίνακας 5.1: Σκυρμιονική φάση σε καμπυλόγραμμες νανοδομές [60, 61, 62, 63].

Σύστημα (L)	$\phi_0$	$N_s$	$p$	$Q$
ΕΣ(50)	0	2601	13.6	7.18
ΚΣ(50)	150	2601	13.6	7.14
ΝΣ(50)	360	2601	13.6	0.87
ΕΣ(100)	0	10201	13.6	37.80
ΚΣ(100)	150	10201	13.6	34.71
ΝΣ(100)	360	10201	13.6	1.86

ίδιων διαστάσεων και διαφορετικής καμπυλότητας. Επίσης, απεικονίζεται το προφίλ της μαγνήτισης του σκυρμιονίου στο επίπεδο σύστημα, δηλαδή, η μαγνήτιση  $M_x$  κατά μήκος του  $y$ -άξονα που διασχίζει το κέντρο του σκυρμιονίου ( $z = 0$ ). Το προφίλ του σκυρμιονίου συμπίπτει με το προφίλ ενός διπλού μαγνητικού τοιχώματος. Σε συστήματα μικρής καμπυλότητας ( $\phi < 100$ ) το σχήμα και το μέγεθος του σκυρμιονίου δεν παρουσιάζει μεταβολές. Σε συστήματα ενδιάμεσης καμπυλότητας ( $100 < \phi < 160$ ) το σχήμα του σκυρμιονίου μετατρέπεται σε ελλειπτικό, το μεγέθός του, όμως, δεν παρουσιάζει σημαντική μεταβολή [60, 61, 62, 63]. Σε συστήματα μεγάλης καμπυλότητας ( $\phi > 160$ ) το σκυρμιόνιο εξαφανίζεται και ο σχηματισμός του δεν είναι πλέον σταθερή (ενεργειακά) κατάσταση.

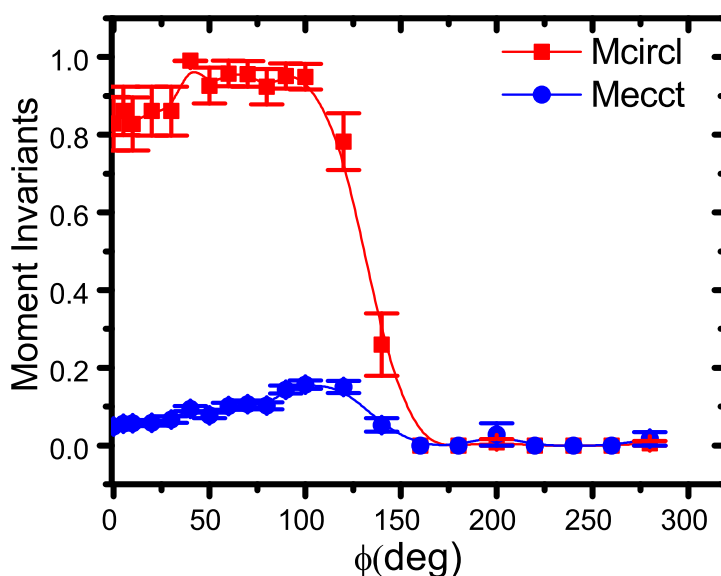


Σχήμα 5.5: (Αριστερό πάνελ) Σχηματισμός σκυρμιονίου σε νανοσυστήματα διαφορετικής καμπυλότητας (a:0°, b:50°, c:100°, d:150°, e:160°, f:200°) κατόπιν ψύξης σε ομογενές εξωτερικό πεδίο. Οι καμπυλωμένες δομές προβάλλονται στο επίπεδο  $y - z$ , δηλαδή η καμπυλότητα δεν απεικονίζεται στο σχήμα, έτσι ώστε να είναι διακριτές οι μεταβολές στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του σκυρμιονίου. (Δεξιό πάνελ) Σκυρμιονικό προφίλ κατά μήκος του άξονα  $z=0$  σε επίπεδη νανοδομή. Το προφίλ του σκυρμιονίου συμπίπτει με το προφίλ ενός διπλού μαγνητικού τοιχώματος. [60, 61, 62, 63].



Οι μεταβολές στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του σκυρμιονίου ποσοτικοποιούνται εφαρμόζοντας ανάλυση σχήματος της σκυρμιονικής περιοχής (S). Η περιοχή αυτή ορίζεται ως η περιοχή της νανολωρίδας για την οποία ισχύουν οι εξής συνθήκες, (i) η μαγνήτιση είναι μικρότερη από τη μαγνήτιση κορεσμού ( $m_{i,x} < 0.95$  για  $B_x > 0$ ) και (ii) το τοπολογικό φορτίο είναι  $Q > 0.5$ .

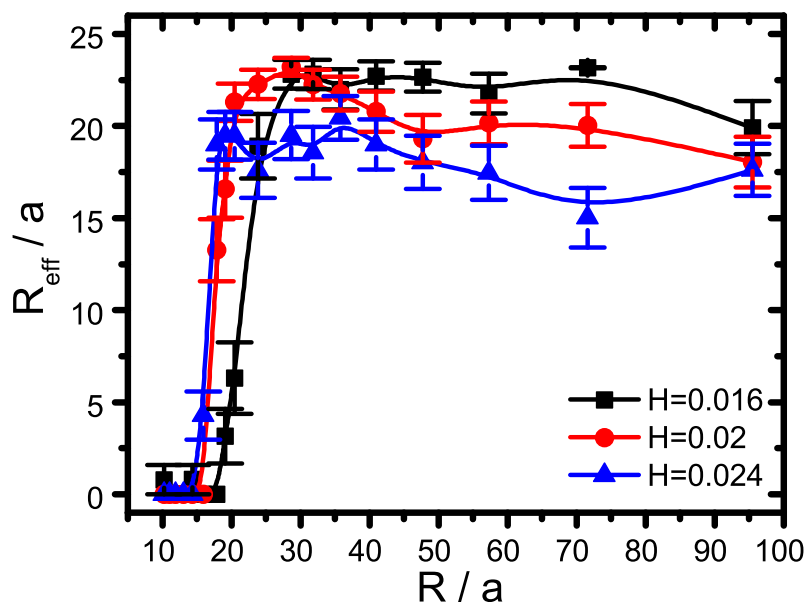
Στο Σχ. 5.6, υπολογίζονται δυο χαρακτηριστικά μεγέθη, η εκκεντρότητα  $M_{ecct}$  και η σφαιρικότητα  $M_{circl}$  (Παράρτημα / Α'.4) της μαγνήτισης συναρτήσει της γωνίας καμπύλωσης. Παρατηρείται, μετατροπή του σχήματος του σκυρμιονίου σε ελλειπτικό χωρίς όμως να μεταβάλλονται πολύ τα μορφολογικά του χαρακτηριστικά. [60, 61, 62, 63].



Σχήμα 5.6: Μελέτη της σφαιρικότητας  $M_{circl}$  και της εκκεντρότητας  $M_{ecct}$  της μαγνήτισης του σκυρμιονίου συναρτήσει της γωνίας καμπύλωσης  $\phi_0$  των νανοδομών. Παρατηρείται σταδιακή αύξηση της εκκεντρότητας του σχήματος των σκυρμιονίων και η μετατροπή του σε ελλειπτικό [60, 61, 62, 63].

Τέλος, υπολογίζεται η ενεργός ακτίνα του σκυρμιονίου  $R_{eff} = \sqrt{2}R_g$  (Σχ. 5.7), με  $R_g$  την ακτίνα περιστροφής της περιοχής S (όταν η περιοχή S είναι κυκλική ισχύει ότι  $R_{eff} = R_g$ ). Το μέγεθος του σκυρμιονίου παραμένει πρακτικά σταθερό ενώ απότομα όταν η ενεργός ακτίνα γίνει ίση με την ακτίνα καμπυλότητας της νανοδομής ( $R = R_{eff}$ ) ο σχηματισμός του δεν είναι επιτρεπτός και καταστρέφεται [60, 61, 62, 63]. Το αποτέλεσμα αυτό είναι σε συμφωνία με το αρχικό αποτέλεσμα του σχήματος (Σχ. 5.4), όπου παρατηρήθηκε απότομη αύξηση του τοπολογικού φορτίου, δηλαδή του αριθμού των σκυρμιονίων, όταν η ακτίνα των νανოსωλήνων

γίνεται ίση με το βήμα της έλικας του συστήματος ( $R = 14a \sim p = 13.6$ ). Οι υπολογισμοί επαναλαμβάνονται μεταβάλλοντας την ένταση του πεδίου ψύξης. Αυξανόμενης της έντασης το μέγεθος του σκυρμιονίου (ενεργός ακτίνα) ελαττώνεται. Σημειώνεται πως η ακτίνα καμπυλότητας της νανοδομής στην οποία πραγματοποιείται η καταστροφή του σκυρμιονίου ακολουθεί αυτή την ελάττωση του μεγέθους του σκυρμιονίου. Σε όλες, δηλαδή, τις διαφορετικές περιπτώσεις εξωτερικού πεδίου ο σχηματισμός του σκυρμιονίου παύει να είναι ευσταθής όταν η ακτίνα καμπυλότητας της νανοδομής γίνει ίση με την ακτίνα του [60, 61, 62, 63].



Σχήμα 5.7: Εξάρτηση της ενεργού ακτίνας  $R_{eff} / a$  των μαγνητικών σκυρμιονίων από την ακτίνα καμπυλότητας  $R / a$  των μαγνητικών νανοδομών, υπό την ανταπόκριση πεδίων ψύξης διαφορετικής ισχύος. Ο σχηματισμός του σκυρμιονίου δεν είναι ενεργειακά επιτρεπτός όταν η ακτίνα του γίνει ίση με την ακτίνα καμπυλότητας της νανοδομής ( $R = R_{eff}$ ) [60, 61, 62, 63].

## 5.4 Συμπεράσματα

Τα μαγνητικά σκυρμιόνια μπορούν να σταθεροποιηθούν σε καμπυλόγραμμες νανοδομές και νανοσωλήνες. Ένας καθοριστικός παράγοντας που διαμορφώνει το σχηματισμό τους είναι η κατεύθυνση του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου κατά τη διαδικασία ψύξης υπό πεδίο. Συγκεκριμένα, τα σκυρμιόνια σταθεροποιούνται

Πίνακας 5.2: Σκυρμιονική φάση σε καμπυλόγραμμες νανοδομές [60, 61, 62, 63].

	$p = 13.6$	$p = 32.8$
J	1	1
D	0.5	0.2
K	0.1	0.016
H	0.1	0.016

Πίνακας 5.3: Αποτελέσματα για το σχηματισμό σκυρμιονίου σε καμπυλωμένα συστήματα διαστάσεων 50 x 50 και βήματος έλικας  $p=32.8$  [60, 61, 62, 63].

Sample	$\phi$	k	$R_{N\Sigma}$	Q
ΕΣ	0	0	$\infty$	0.84
ΚΣ1	50	0.018	55.6	0.83
ΚΣ2	100	0.028	35.7	0.84
ΚΣ3	150	0.04	25	0.99
ΚΣ4	160	0.052	19.2	0.52
ΚΣ5	200	0.056	17.9	0.1

στη ράχη των καμπυλόγραμμων νανοδομών και νανοσωλήνων όπου το εξωτερικό πεδίο είναι κάθετο. Αντίθετα, παραπλεύρως, όπου το πεδίο είναι παράλληλο, σχηματίζονται σπείρες. Ακόμα, τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των σκυρμιονίων σε νανοσωλήνες εξαρτώνται άμεσα από την καμπυλότητα των νανοδομών. Συγκεκριμένα, σε συστήματα μικρής καμπυλότητας δεν παρατηρούνται μεταβολές στο σχήμα των σκυρμιονίων ενώ περαιτέρω αύξηση της καμπυλότητας οδηγεί σε ελλειπτικού σχήματος σκυρμιόνια. Τέλος, η σταθεροποίηση των σκυρμιονίων σε νανοσωλήνες είναι εφικτή μόνο όταν η ακτίνα τους είναι μικρότερη από την ακτίνα καμπυλότητας των νανοσωλήνων [60, 61, 62, 63].



# Κεφάλαιο 6

## Επίλογος

Στην παρούσα διατριβή, μελετήθηκαν επιμήκη νανοσυστήματα (νανοσύρματα, νανοσωλήνες), που έχουν εξαιρετικό τεχνολογικό ενδιαφέρον εξαιτίας της υψηλής ανισοτροπίας σχήματος που παρουσιάζουν και τα καθιστά κατάλληλα για την κατασκευή σύγχρονων συστημάτων μαγνητικής αποθήκευσης. Ακόμα, το σχεδόν μονοδιάστατο σχήμα τους επιτρέπει την αξιοποίησή τους ως μέσα σχηματισμού και διάδοσης μαγνητικών διεγέρσεων σολιτονικού χαρακτήρα (μαγνητικά τοιχώματα, σκυρμιόνια) που μπορούν να αξιοποιηθούν ως φορείς ψηφιακής πληροφορίας σε διατάξεις μονοδρομικής μνήμης.

Βασικά ερωτήματα που ανακύπτουν σε αυτό το πλαίσιο, είναι η επίδραση του φαινομένου πόλωσης ανταλλαγής, φαινομένου γνωστού για τη διαμόρφωση των χαρακτηριστικών υστέρησης, στη μαγνητική συμπεριφορά αυτών των συστημάτων αλλά και ο έλεγχος του σχηματισμού και της διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων σε αυτά.

Πραγματοποιώντας ένα μικρομαγνητικό υπολογιστικό μοντέλο με κλασική κατά Heisenberg περιγραφή των μαγνητικών συστημάτων και εφαρμόζοντας τη μέθοδο Metropolis Monte Carlo, παρατηρήθηκε πως η παρουσία ενός αντισιδηρομαγνητικού φλοιού οδηγεί σε ελάττωση του συνεκτικού πεδίου των διμαγνητικών νανοσυρμάτων και σε αύξηση της ευκινησίας διάδοσης των μαγνητικών τοιχωμάτων. Τα δυο αυτά φαινόμενα σχετίζονται με την ανάπτυξη ενός δεύτερου μηχανισμού αντιστροφής, με χαρακτηριστικά σύμφωνης στροφής, στο κέντρο του σύρματος που διευκολύνει την αντιστροφή της μαγνήτισης. Ακόμα, η ύπαρξη πολυκρυσταλλικότητας στο φλοιό, εισάγει έναν επιπλέον άξονα εύκολης μαγνήτισης, που οδηγεί σε βελτιστοποίηση του φαινομένου πόλωσης - ανταλλαγής σε διεύθυνση εκτός του κεντρικού άξονα. Επίσης, οδηγεί σε αύξηση της κρίσιμης διαμέτρου στην οποία

πραγματοποιείται μετάβαση από εγκάρσια μαγνητικά τοιχώματα σε μαγνητικές δί-  
νες.

Μελετώντας σιδηρομαγνητικά νανοσύρματα που φέρουν περιοδικές γεωμετρι-  
κές διαμορφώσεις της διαμέτρου τους, διαπιστώθηκε ότι οι στενώσεις κατά μήκος  
ενός νανοσύρματος λειτουργούν ως ελεγχόμενα (από το εξωτερικό πεδίο) κέντρα  
παγίδευσης, που επιτρέπουν την αξιοποίηση αυτών των συστημάτων σε διατάξεις  
μονοδρομικής μνήμης.

Τέλος, η μελέτη του σχηματισμού των μαγνητικών σκυρμιονίων σε καμπυλό-  
γραμμες νανοδομές και νανοσωλήνες ανέδειξε πως ο σχηματισμός των σκυρμιο-  
νίων σε αυτά τα συστήματα είναι επιτρεπτός, χωρίς να αλλοιώνονται τα τοπολο-  
γικά τους χαρακτηριστικά, εφόσον η καμπυλότητα είναι μεγαλύτερη από την ακτίνα  
του σκυρμιονίου, οριοθετώντας έτσι το σχηματισμό τους.

Τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά των σκυρμιονίων, όπως οι χαμηλές τιμές κρίσιμου  
πολωμένου ρεύματος που απαιτείται για τη μετακίνησή τους, η μεγάλη ευκινησία  
διάδοσης που αποκτούν αλλά και η ιδιαίτερα μεγάλη ευστάθεια που παρουσιά-  
ζουν σε δομικές και θερμικές διακυμάνσεις προσελκύουν το ερευνητικό ενδιαφέ-  
ρον. Για την αξιοποίησή τους όμως σε διατάξεις μονοδρομικής μνήμης απαιτείται  
η αντιμετώπιση του σκυρμιονικού φαινομένου Hall, η εκτροπή τους δηλαδή στα  
πλευρικά όρια των νανολωρίδων που οδηγεί τελικά στην καταστροφή τους. Στην  
παρούσα διατριβή, οι νανοσωλήνες, ως συστήματα με ελεύθερα άκρα, προτείνο-  
νται ως εναλλακτική προοπτική για την αντιμετώπιση αυτού του φαινομένου. Η  
θεωρητική πρόβλεψη του επιτυχούς σχηματισμού τους σε καμπυλωμένα συστή-  
ματα καθιστά ενδιαφέρουσα μελλοντική εργασία (α) την πειραματική επιβεβαίωση  
του σχηματισμού τους αλλά και του κριτηρίου ευστάθειας (β) τη θεωρητική και πει-  
ραματική μελέτη της διάδοσής τους σε αυτά τα συστήματα.

# Παράρτημα Α΄

## Παράρτημα

### Α΄.1 Διακριτοποίηση μικρομαγνητικής ενέργειας

Οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής μεταξύ των κόκκων σε ένα διακριτοποιημένο μέσο (πλέγμα) υπολογίζονται ξεκινώντας από το συνεχές όριο της,

$$E(ex) = \int dV A |\nabla \vec{m}|^2 \quad (\text{A}^\prime.1)$$

Θεωρώντας απλό κυβικό πλέγμα, ένα κεντρικό άτομο περιβάλλεται από έξι γειτονικά άτομα, που είναι τοποθετημένα στις  $\pm\alpha\hat{x}$ ,  $\pm\alpha\hat{y}$ ,  $\pm\alpha\hat{z}$  θέσεις. Προσμετρώντας μόνο τους δεσμούς κατά τη θετική διεύθυνση, έτσι ώστε να αποφεύγεται η διπλή άθροιση, διακριτοποιείται η συνεχής έκφραση ως εξής,

$$E(ex, cel) = A \cdot V_{cel} \times \left\{ \left( \frac{\vec{m}(\alpha\hat{x}) - \vec{m}(0)}{\alpha} \right)^2 + \left( \frac{\vec{m}(\alpha\hat{y}) - \vec{m}(0)}{\alpha} \right)^2 + \left( \frac{\vec{m}(\alpha\hat{z}) - \vec{m}(0)}{\alpha} \right)^2 \right\} \quad (\text{A}^\prime.2)$$

Πραγματοποιώντας τους υπολογισμούς προκύπτει,

$$E(ex, cel) = \frac{AV_{cel}}{\alpha^2} \{ 6\vec{m}^2 - 2\vec{m}(0) \cdot [\vec{m}(\alpha\hat{x}) + \vec{m}(\alpha\hat{y}) + \vec{m}(\alpha\hat{z})] \} \quad (\text{A}^\prime.3)$$

Λαμβάνοντας υπόψη πως η μαγνήτιση σε κάθε κόκκο είναι κορεσμένη, δηλαδή το διάνυσμα  $\vec{m}(r) = M(r)/M_s$  είναι μοναδιαίο προκύπτει,

$$E(ex, cel) = \frac{2AV_{cel}}{\alpha^2} \{ 3 - \vec{m}(0) \cdot [\vec{m}(\alpha\hat{x}) + \vec{m}(\alpha\hat{y}) + \vec{m}(\alpha\hat{z})] \} \quad (\text{A}^\prime.4)$$

Τελικά, ο όρος της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής ανά δεσμό μπορεί να γραφτεί ως εξής,

$$E(ex, bond) = \frac{2AV_{cel}}{\alpha^2} \{1 - \overrightarrow{\mathbf{m}}(0) \cdot [\overrightarrow{\mathbf{m}}(\alpha\hat{x})]\} = E_0 - J_{cel}\hat{m}_i\hat{m}_j \quad (\text{A'.5})$$

Επομένως, η ισχύς των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής στη μικρομαγνητική μέθοδο δίνεται από τη σχέση,

$$J_{cel} = \frac{2AV_{cel}}{\alpha^2} = 2A\alpha \quad (\text{A'.6})$$

Αντίστοιχη διαδικασία ακολουθείται και για τον υπολογισμό της σύζευξης των αλληλεπιδράσεων DM,  $\vec{D}$ , στο διακριτοποιημένο πλέγμα. Η ενέργεια των αλληλεπιδράσεων αυτών μεταξύ ενός κεντρικού κόκκου  $i=0$  και των γειτονικών του δίνεται στο συνεχές όριο από τη σχέση,

$$E_{DMI} = V_{cel} \cdot d [(\hat{m}\vec{\nabla})m_x - m_x(\vec{\nabla}\hat{m})] \quad (\text{A'.7})$$

Διακριτοποιώντας τη σχέση και πραγματοποιώντας τους υπολογισμούς προκύπτει,

$$E_{DMI} \approx \frac{V_{cel} \cdot d}{\alpha} [m_y(0)m_x(\alpha\hat{y}) - m_x(0)m_y(\alpha\hat{y})] + \frac{V_{cel} \cdot d}{\alpha} [m_z(0)m_x(\alpha\hat{z}) - m_x(0)m_z(\alpha\hat{z})]$$

Η τελευταία έκφραση γράφεται στη μορφή,

$$E_{DM} \approx -\frac{V_{cel} \cdot d}{a} \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ m_x(0) & m_y(0) & m_z(0) \\ m_x(\hat{z}) & m_y(\hat{z}) & m_z(\hat{z}) \end{vmatrix} + \frac{V_{cel} \cdot d}{a} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ m_x(0) & m_y(0) & m_z(0) \\ m_x(\hat{y}) & m_y(\hat{y}) & m_z(\hat{y}) \end{vmatrix}$$

που ισοδυναμεί με τη σχέση,

$$E_{DMI} = \frac{V_{cel} \cdot d}{\alpha} [\hat{y}(\hat{m}(0) \times \hat{m}(\hat{z})) + \hat{z}(\hat{m}(0) \times \hat{m}(\hat{y}))]$$

δηλαδή,

$$E_{DMI} = \frac{V_{cel} \cdot d}{\alpha} [(\hat{x} \times \hat{z})(\hat{m}(0) \times \hat{m}(\alpha\hat{z})) + (\hat{x} \times \hat{y})(\hat{m}(0) \times \hat{m}(\alpha\hat{y}))]$$



Τελικά, προκύπτει

$$E_{DM} \approx -\frac{V_{cel} \cdot d}{a} \cdot \sum_{\hat{\delta}} (\hat{x} \times \hat{\delta})(\hat{m}(0) \times \hat{m}(\hat{\delta})) \quad (A'.8)$$

όπου  $\hat{\delta}$  είναι το μοναδιαίο διάνυσμα που καθορίζει τη διεύθυνση των δεσμών μεταξύ πρώτων γειτόνων. Η παράμετρος των αλληλεπιδράσεων DM δίνεται, τελικά, από τη σχέση,

$$D = d \cdot \alpha^2. \quad (A'.9)$$

Η ισχύς των διπολικών αλληλεπιδράσεων στο διακριτοποιημένο μικρομαγνητικό μοντέλο δίνεται από τη σχέση,

$$g = \frac{\mu_0 \mu_{cel}^2}{4\pi \alpha^3}. \quad (A'.10)$$

Τέλος, η ισχύς της ενέργειας ανισοτροπίας υπολογίζεται από τη σχέση,

$$K = K_u \cdot V_{cel} = K_u \cdot \alpha^3 \quad (A'.11)$$

## A'.2 Υπολογισμός θέσης και ταχύτητας μαγνητικών τοιχωμάτων

Ο αλγόριθμος μέσω του οποίου πραγματοποιείται ο υπολογισμός της θέσης είναι αρκετά απλοϊκός. Αρχικά, υπολογίζεται σε κάθε MCSS η μέση μαγνήτιση  $Mz_i$  κάθε "ατομικού" επιπέδου  $i$ . Στη συνέχεια, υπολογίζονται (ανά ζεύγη γειτονικών ατομικών επιπέδων) τα γινόμενα των μαγνητίσεων. Αν το γινόμενο είναι αρνητικό αυτό σημαίνει πως βρισκόμαστε στο κέντρο του μαγνητικού τοιχώματος. Για να υπολογίσουμε τη θέση εφαρμόζουμε γραμμική παρεμβολή μεταξύ των δυο γειτονικών επιπέδων και υπολογίζουμε το κέντρο του μαγνητικού τοιχώματος. Ο αλγόριθμος σε κάθε MCSS συνοψίζεται ως εξής,

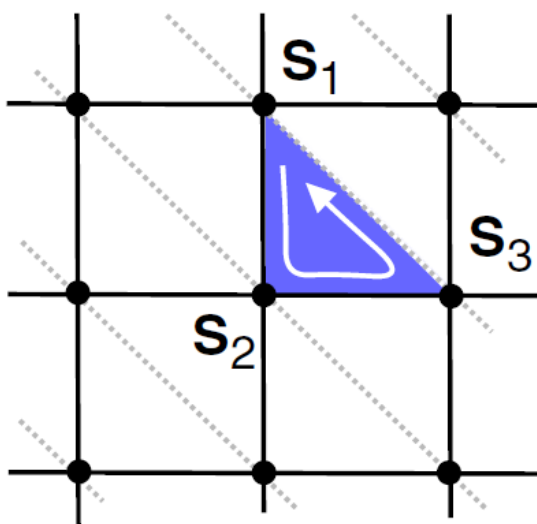
1. Υπολογισμός της z-συνιστώσας της μαγνήτισης  $y=Mz_i$  κάθε ατομικού επιπέδου  $x=i$
2. Υπολογισμός του γινομένου  $\Delta M=y_1 \cdot y_2 = Mz_i \cdot Mz_{i+1}$
3. Αν  $\Delta M < 0$ , κατάγραφή του ζεύγους των μαγνητικών ροπών

4. Εφαρμογή της σχέσης  $DW = (x_2 \cdot y_1 - x_1 \cdot y_2) / (y_1 - y_2)$  για τον υπολογισμό του μέσου του μαγνητικού τοιχώματος.
5. Καταγραφή της θέσης.

Καταγράφοντας την θέση  $z$  του μέσου του μαγνητικού τοιχώματος συναρτήσει του χρόνου κατασκευάζουμε το διάγραμμα  $z(t)$ . Λαμβάνοντας υπόψη πως η εξάρτηση της θέσης του μαγνητικού τοιχώματος είναι γραμμική με το χρόνο (όριο υψηλής μετάπτωσης) εφαρμόζουμε τη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων για τον υπολογισμό της ταχύτητας των μαγνητικών τοιχωμάτων.

### Α΄.3 Υπολογισμός τοπολογικού φορτίου μαγνητικών σκυρμιονίων

Στην παρούσα εργασία, πραγματοποιείται μικρομαγνητική μελέτη σε συστήματα που αποτελούνται από διακριτό αριθμό μαγνητικών ροπών. Επομένως, δεν είναι δυνατή η χρήση της Εξ. (1.73) για τον υπολογισμό του τοπολογικού φορτίου. Κατά συνέπεια, ακολουθείται η διαδικασία που προτάθηκε από τους Berg et al [157], κατά την οποία το τοπολογικό φορτίο υπολογίζεται σε διακριτοποιημένο πλέγμα. Αρχικά, ο υπολογισμός πραγματοποιείται τριγωνοποιώντας το πλέγμα όπως φαίνεται στο σχήμα Σχ. Α΄.1.



Σχήμα Α΄.1: Τριγωνοποιημένο τετραγωνικό πλέγμα. Η φορά τοποθέτησης των μαγνητικών ροπών σε κάθε τρίγωνο είναι αντιωρολογιακή.

Στη συνέχεια σε κάθε διακριτό τρίγωνο  $\Delta(S_1, S_2, S_3)$  υπολογίζεται η στερεά γωνία  $\Omega_\Delta$  που καθορίζεται από τη σχέση,

$$e^{i\Omega_\Delta} = p^{-1}[1 + S_1 \cdot S_2 + S_2 \cdot S_3 + S_3 \cdot S_1 + iS_1 \cdot (S_2 \times S_3)]. \quad (\text{A'.12})$$

όπου,  $-2\pi < \Omega_\Delta < 2\pi$  και  $p = [2(1 + S_1 \cdot S_2)(1 + S_2 \cdot S_3)(1 + S_3 \cdot S_1)]^{1/2}$ . Τέλος, το διακριτοποιημένο τοπολογικό φορτίο υπολογίζεται από το άθροισμα

$$Q = \frac{1}{4\pi} \sum_{\Delta} \Omega_\Delta. \quad (\text{A'.13})$$

## A'.4 Υπολογισμός σχήματος και ακτίνας μαγνητικών σκυρμιονίων

Ο υπολογισμός των χαρακτηριστικών του σχήματος των σκυρμιονίων πραγματοποιείται μέσω αλγορίθμου ανάλυσης σχήματος [158, 159]. Αρχικά, υπολογίζονται οι συντεταγμένες του κέντρου  $(y_c, z_c)$  του σκυρμιονίου στο δισδιάστατο απλό κυβικό πλέγμα. Στη συνέχεια, υπολογίζονται με τη βοήθεια της σχέσης

$$\mu_{p,q} = \frac{1}{N_{Sk}} \sum_{y,z} (y - y_c)^p \cdot (z - z_c)^q. \quad (\text{A'.14})$$

τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά σφαιρικότητα  $M_{circl}$  και εκκεντρότητα  $M_{ecct}$  που φανερώνουν αν το σχήμα του σκυρμιονίου είναι κυκλικό ( $M_{circl}=1$ ) ή ελλειπτικό ( $M_{circl}<1$  και ( $M_{ecct}>0$ )). Τέλος, υπολογίζεται η ενεργός ακτίνα  $R_{eff}$  που συνοψίζει την μέση ακτίνα του σκυρμιονίου, δηλαδή  $R_{eff} = R$  στα σφαιρικά σχήματα και  $R_{eff} = (R_1 + R_2)/2$  στα ελλειπτικά σχήματα, με  $R_1, R_2$  ο μεγάλος και μικρός ημιάξονας της έλλειψης. Ο αλγόριθμος εφαρμόζεται στα δείγματα που ικανοποιούν το κριτήριο  $Q>0.5$  δηλαδή στα δείγματα όπου εμφανίζονται μαγνητικά σκυρμιόνια συνοψίζεται ως εξής,

1. Υπολογισμός του κέντρου του σκυρμιονίου  $y_c = \langle y \rangle, z_c = \langle z \rangle$
2. Υπολογισμός των ποσοτήτων  $\mu_{20}, \mu_{02}, \mu_{11}$
3. Υπολογισμός της σφαιρικότητας  $M_{circl} = N_{Sk}/\mu_{20} + \mu_{02}$
4. Υπολογισμός της εκκεντρότητας  $M_{ecct} = \frac{\sqrt{(\mu_{20} + \mu_{02})^2 + 4\mu_{11}^2}}{\mu_{20} + \mu_{02}}$

5. Υπολογισμός της ενεργού ακτίνας  $R_{eff} = \sqrt{2 \cdot (\mu_{20} + \mu_{02})}$
6. Υπολογισμός μέσω των όρων των ποσοτήτων  $M_{circl}$ ,  $M_{ecct}$ ,  $R_{eff}$  στο σύνολο των διαφορετικών δειγμάτων

# Βιβλιογραφία

- [1] N. W Ashcroft, N.D. Mermin, Solid state Physics, Cornel University (1976)
- [2] R. C. O'Hanldey, MODERN MAGNETIC MATERIALS Principals and Applications, Massachusetts Institute of Technology
- [3] B. D. Cullity and C. D. Graham, INTRODUCTION TO MAGNETIC MATERIALS second edition, IEEE Press (2009)
- [4] S. Chikazumi, Physics Of Ferromagnetism, OXFORD SCIENCE PUBLICATIONS
- [5] W. Z. Heisenberg, Physik (1928) 49: 619
- [6] W. Z. Heisenberg, Physik (1926) 38: 411
- [7] W. Z. Heisenberg, Physik (1926) 39: 499
- [8] I. Dzialoshinsky, J. Phys. Chem. Solids 4, 241 (1958)
- [9] T. Moriya, Phys. Rev. 120, 91 (1960)
- [10] A. Fert, N. Reyren and V. Cros, Nat. Rev. Mats 2 17031 (2017)
- [11] D. Kechrakos, Magnetic Nanoparticle Assemblies, Handbook of Nanophysics - Vol.3: Nanoparticles and Quantum Dots, Edition: 1, Chapter: 22, Pages: 22 / 1-15, Publisher: CRC Press - Taylor and Francis Group, Editors: Klaus D. Sattler
- [12] A. P. Guimarães, Principles of Nanomagnetism, NanoScience and Technology
- [13] C. P. Bean and J. D. Livingston, J. Appl. Phys. 30, 120-129 (1959)

- [14] N. A. Frey, S. Peng, K. Cheng and S. Sun, *Chem. Soc. Rev.* 38(9), 2532-2542 (2009)
- [15] R. E. Fontana and G. M. Decad, *AIP Advances* 8, 056506 (2018)
- [16] D. J. Sellmeyer, M. Zheng and R. Skomski, *J. Phys. : Condens. Matter* 13, R433 (2001)
- [17] L. Berger, *Phys. Rev. B* 54 (1996) 9353
- [18] L. Berger, *J. Appl. Phys.* 90 (2001) 4632
- [19] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* 61 (1988) 2472
- [20] G. Binasch, P. Grunberg, F. Saurenbach and W. Zinn, *Phys. Rev. B* 39 (1989) 4828
- [21] S. S. S. Parkin, M. ayashi and L. Thomas, *Science* 320 (2008) 190
- [22] S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* 56, 665 (1990)
- [23] N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nat. Nanotechnol.* 8, 899 (2013)
- [24] G. Finocchio, F. Büttner, R. Tomasello, M. Carpentieri and M. Kläui, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 49 423001 (2016)
- [25] W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, *Phys. Rev.* 102, 1413 (1956)
- [26] W. H. Meiklejohn and C. P. Bean, *Phys. Rev.* 105, 904 (1957)
- [27] J. Nogues and I. K. Schuller, *J. Magn. Magn. Mater.* 192, 203 (1999)
- [28] J. Nogues, J. Sort, V. Langlais, V. Skumryev, S. Surinach, J. S. Munoz and M. D. Baro, *Phys. Rep.* 422, 65 (2005)
- [29] O. Iglesias, A. Labarta and X. Batle, *J. Nanosci. Nanotechnol.* 8, 2761 (2008)
- [30] J. C. S. Kools, *IEEE Trans. Magn.* 32 (4) (1996) 3165–3184
- [31] F. Radu and H. Zabel, *SPRINGER TRACTS IN MODERN PHYSICS* 227, 97-184 (2007)

- [32] M. Kiwi. Topical Review Exchange bias theory. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 234, 584-595 (2001)
- [33] E. C Stoner and E. P. Wohlfarth, *Proc. R. Soc. Lond. A* 240, 599-642 (1948).
- [34] A. P. Malozemoff, *Phys. Rev. B* 35, 3679(R)(1987).
- [35] D. Mauri, H. C. Siegmann, P. S. Bagus, and E. Kay, *J. Appl. Phys.* 62, 3047 (1987)
- [36] K. Terashima, K. Suzuki and K. Yamaguchi, *Physica B* 52-56 (2016) 486
- [37] A. N. Bogdanov and A. Hubert, *J. Magn. Magn. Matter* 138,255 (1994)
- [38] S. Seki and M. Mochizuki, *Skymions in Magnetic Materials*, SPRINGER (2016)
- [39] A. Fert, V. Cros and J. Sampaio, *Nat. Nanotechnol.* 8, 152 (2013)
- [40] J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart, A. Thiaville and A. Fert, *Nat. Nanotechnol.* 8, 839 (2013)
- [41] J. Iwasaki, M. Mochizuki and N. Nagaosa, *Nat. Commun.* 4, 1463 (2013)
- [42] X. Z. Yu, N. Kanazawa, W. Z. Zhang, T. Nagai, T. Hara, K. Kimoto, Y. Matsui, Y. Onose and Y. Tokura, *Nat. Commun.* 3, 988 (2012)
- [43] L. A. Bauer, N. S. Birenbaum and G. J. Meyer, *J. Mater. Chem.* 14, 517 (2004)
- [44] P. Tartaj, *Curr.Nanosciece* 2, 43 (2006)
- [45] C. Tannous and J. Gieraltowski, *Eur. J. Phys.* 29, 475 (2008)
- [46] W. Wernsdorfer, E. B. Orozco, K. Hasselbach, A. Benoit, B. Barbara, N. Demoncy, A. Loiseau, H. Pascard, and D. Mailly, *Phys. Rev. Lett.* 78, 1791 (1997)
- [47] R. Fert and L. Piraux, *J. Magn. Magn. Mater.* 200, 338 (1999)
- [48] A. Thiaville and Y. Nakatani, *Topics Appl. Physics* 101, 161 (2006)
- [49] D. Hinzke and U. Nowak, *J. Magn. Magn. Mater.* 221, 365 (2000)

- [50] R. Wieser, U. Nowak, and K. D. Usadel, Phys. Rev. B 69, 064401 (2004)
- [51] R. Streubel, P. Fischer, F. Kronast, V. P. Kravchuk, D. D. Sheka, Y. Gaididei, O. G Schmidt and D. Makarov, J. Phys. D: Appl. Phys. 49 (2016) 363001
- [52] N. Ran, G. P. Zhao, H. Tang, L. C. Shen, P. Lai, J. Xia, X. Zhang and Y. Zhou, AIP ADVANCES 7, 025105 (2017)
- [53] G. Hrkac, J. Dean and D. A. Allwood, Phil. Trans. R. Soc. A 369, 3214 (2011)
- [54] J. Leliart, Magnetic disorder and thermal fluctuations in domain wall motion and nanoparticle dynamics, Doctoral Thesis, Pages: 14 - 19, University of Gent (Belgium), Faculty of Sciences, 2016
- [55] A. Patsopoulos and D. Kechrakos, Nanotechnology 28 (2017) 285701
- [56] A. Patsopoulos, D. Kechrakos, O. Chubykalo-Fesenko, C. Simserides and G. P. Triberis, "Atomistic modelling of the exchange bias effect in magnetic nanowires", 8th European Magnetic Symposia (JEMS 2016), 21-26 August 2016, Glasgow, UK
- [57] A. Patsopoulos, D. Kechrakos, O. Chubykalo-Fesenko, C. Simserides and G. P. Triberis, "Monte Carlo study of Domain Wall propagation in Ferromagnetic – Antiferromagnetic nanowires", 2nd Marie Curie School on Domain Walls and Spintronics, 12-16 September 2016, Spetses, Greece
- [58] A. Patsopoulos, D. Kechrakos, O. Chubykalo-Fesenko, C. Simserides and G. P. Triberis "Modeling domain wall velocity in bi-magnetic nanowires", XXXII Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, 18-21 September 2016, Ioannina, Greece
- [59] "Φαινόμενο πόλωσης-ανταλλαγής και δυναμική των μαγνητικών τοιχωμάτων σε νανοσύρματα μορφολογίας πυρήνα/φλοιού", ημερίδα υποψηφίων διδασκτόρων του τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ, 10 Φεβρουαρίου 2017, Αθήνα, Ελλάδα
- [60] A. Patsopoulos, D. Kechrakos "Magnetic skyrmions in cylindrical nanostructures with chiral interactions", Υπό δημοσίευση



- [61] A. Patsopoulos and D. Kechrakos, "Μελέτη του σχηματισμού μαγνητικών σκυρμιονίων σε καμπυλόγραμμες νανοδομές", ημερίδα υποψηφίων διδασκτόρων του τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ, 8 Φεβρουαρίου 2019, Αθήνα, Ελλάδα
- [62] A. Patsopoulos and D. Kechrakos, "Skyrmions in cylindrical magnetic nanoshells with chiral interaction", The 6th Italian Conference on Magnetism (MAGNET 2019), 30 January - 1 February 2019, Messina, Italy
- [63] A. Patsopoulos and D. Kechrakos, "Magnetic skyrmion formation on cylindrical surfaces with chiral interactions", Hysteresis Modeling and Micromagnetics (HMM2019), 19-22 May 2019, Heraklion, Crete
- [64] V. Russier, J.Appl.Phys., 89, p.1287, (2001)
- [65] M. E. J. NEWMAN and G. T. BARKEMA, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, OXFORD UNIVERSITY PRESS, 2001, p. 3-53
- [66] K. Binder and D. Stauffer, A Simple Introduction to Monte Carlo Simulation and Some Specialized Topics, p. 1-35
- [67] L. D. Landau and E. M. Lifshitz: Statistical Physics, Pergamon Press, London 1959, p. 284-300
- [68] D. Hinzke and U. Nowak, Phys. Rev. B 61, 6734 (2000)
- [69] J. G. Ovejero, C. Bran , E. Vilanova, J. Kosel, M. P. Morales, and M. Vázquez, J. Magn. Mater. 389 (2015) 144
- [70] Y. Soumare, J. Y. Piquemal, T. Maurer, F. Ott, G. Chaboussant, A. Falqui and G. Viau, J. Mater. Chem. 18 (46) (2008) 5696–5702
- [71] K. Gandha, K. Elkins, N. Poudyal, X. Liu and J. P. Liu, Sci. Rep. 4 (2014) 5345
- [72] Y. P. Ivanov, A. Chuvilin, L. G. Vivas, J. Kosel, O. Chubykalo-Fesenko and M. Vázquez, Sci. Rep. 6 (2016) 23844
- [73] T. Maurer, F. Zighem, F. Ott, G. Chaboussant, G. André, Y. Soumare, J. Y. Piquemal, G. Viau and C. Gatel, Phys. Rev. B 80 (2009) 064427

- [74] D. Tripathy, A. O. Adeyeye, K. Chakrabarti and N. Singh, *J. Appl. Phys.* 107 (2010) 09D705–1
- [75] K. Gandha, R. P. Chaudhary, J. Mohapatra, A. R. Koymen and J. P. Liu, *Physics Letters A* 381 (25) (2017) 2092
- [76] A. Buchter, R. Wölbing, M. Wyss, O. F. Kieler, T. Weimann, J. Kohlmann, A. B. Zorin, D. Ruffer, F. Matteini, G. Tütüncüoglu, F. Heimbach, A. Kleibert, M. Fontcuberta I Morral, D. Grundler, R. Kleiner, D. Koelle and M. Poggio, *Phys. Rev. B* 92 (21) (2015) 214432
- [77] M. P. Proenca, J. Ventura, C. T. Sousa, M. Vázquez and J. P. Araujo, *Phys. Rev. B* 87 (13) (2013) 134404
- [78] M. Irfan, C. J. Wang, U. Khan, W. J. Li, X. M. Zhang, W. J. Kong, P. Liu, C. H. Wan, Y. W. Liu and X. F. Han, *Nanoscale* 9 (2017) 5694–5700
- [79] U. Khan, M. Irfan, W. J. Li, N. Adeela, P. Liu, Q. T. Zhang and X. F. Han, *Nanoscale* 8 (2016) 14956–14964
- [80] U. Khan, W. J. Li, N. Adeela, M. Irfan, K. Javed, C. H. Wan, S. Riaz and X. F. Han, *Nanoscale* 8 (2016) 6064–6070
- [81] G. Salazar-Alvarez, J. Geshev, S. Agramunt-Puig, C. Navau, A. Sanchez, J. Sort and J. Nogués, *Appl. Mater. Interfaces* 8 (34) (2016) 22477–22483
- [82] S. Allende, D. Altbir, E. Salcedo, M. Bahiana and J. P. Sinnecker, *J. Appl. Phys.* 104, 013907 (2008)
- [83] C. H. T. Chang, S. C. Chen, J. S. Tsay and Y. D. Yao, *Appl. Surf. Science* 405 (2017) 316
- [84] Y. Bai, G. Yun and N. Bai, *J. Appl. Phys.* 107 (3)
- [85] Y. Bai and X. Xu, *J. Magn. Magn. Mater.* 432 (2017) 342–350
- [86] R. Hertel, *J. Magn. Magn. Mater.*, 249, 251 (2002)
- [87] H. Forster, T. Schrefl, W. Scholz, D. Suess, V. Tsiantos, and J. Fidler, *J. Magn. Magn. Mater.* 249, 181 (2002)
- [88] A. Aharoni, *Theory of Ferromagnetism* (Oxford University Press, 1996)

- [89] F. Spizzo, E. Bonfiglioli, M. Tamisari, A. Gerardino, G. Barucca, A. Notargiacomo, F. Chinni and L. Del Bianco, *Phys. Rev. B* 91, 064410 (2015)
- [90] R. F. L. Evans, W. J. Fan, P. Chureemart, T. A. Ostler, M. O. A. Ellis and R. W. Chantrell, *J. Phys. : Condens. Matter* 26, 103202 (2014)
- [91] A. Patsopoulos and D. Kechrakos, *J. Magn. Magn. Mater.* 465 (2018) 678-684
- [92] A. Patsopoulos and D. Kechrakos "Exchange-bias effect in surface-oxidized ferromagnetic nanowires with polycrystalline shells", *IEEE-Advances in Magnetism (AIM 2018)*, 4-7 February 2018, La Thuile, Italy
- [93] A. Patsopoulos and D. Kechrakos, "Magnetic properties of nanowires with ferromagnetic core and polycrystalline antiferromagnetic shell", *9th European Magnetic Symposia (JEMS 2018)*, 03-07 September 2018, Mainz, Germany
- [94] A. Patsopoulos and D. Kechrakos, "Magnetic Properties of cylindrical ferromagnetic nanowires with antiferromagnetic shell – A Monte Carlo study", *XXXIII Panhellenic Conference on Solid State Physics And Materials Science*, 17-19 September 2018, Nicosia, Cyprus
- [95] A. Patsopoulos and D. Kechrakos, "Επίδραση της πολυκρυσταλλικότητας του φλοιού στη μαγνητική συμπεριφορά νανοσυρμάτων Co/CoO", ημερίδα υποψηφίων διδακτόρων του τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του τμήματος Φυσικής του ΕΚΠΑ, 9 Φεβρουαρίου 2018, Αθήνα, Ελλάδα
- [96] A. Patsopoulos, D. Kechrakos and N. Moutis, *J. Magn. Magn. Mater.* 475 (2019) 171-175
- [97] R. Evans, D. Bate, R. Chantrell, R. Yanes and O. Chubykalo-Fesenko, *Phys. Rev. B* 84, 092404 (2011)
- [98] V. Dimitriadis, D. Kechrakos, O. Chubykalo-Fesenko and V. Tsiantos, *Phys. Rev. B* 92 (2015) 064420
- [99] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, 1999

- [100] G. M. Wysin, *J. Phys. : Condens. Matter* 22, 376002 (2010)
- [101] D. Toscano, S. A. Leonel, P. Z. Coura, F. Sato, B. V. Costa and M. Vázquez, *J. Magn. Magn. Mater.* 419, 37 (2016)
- [102] M. Pousthomis, E. Anagnostopoulou, I. Panagiotopoulos, R. Boubekri, W. Fang, F. Ott, K. A. Atmane, J. Y. Piquemal, L. M. Lacroix and G. Viau, *Nano Research* 8, 2231 (2015)
- [103] G. Bertotti, *Hysteresis in Magnetism* (Academic, New York, 1998)
- [104] A. Thiaville, J. Garcia and J. Miltat, *J. Magn. Magn. Mater.* 242-245 (2002) 1061–1063
- [105] G. Herzer, *IEEE Trans. Magn.* 26 (5) (1990) 1397–1402
- [106] E. Jiménez, J. Camarero, J. Sort, J. Nogués, N. Mikuszeit, J. M. García-Martín, A. Hoffmann, B. Dieny and R. Miranda, *Phys. Rev. B* 80 (2009) 014415
- [107] P. Lendecke, R. Eiselt, G. Meier and U. Merkt, *Journal of Applied Physics* 103, 073909 (2008)
- [108] R. Cowburn, D. Allwood, G. Xiong and M. Cooke, *Journal of applied physics* 91, 6949-6951 (2002)
- [109] F. Fournel, Y. Chen, F. Carcenac, N. Essaidi, H. Launois, V. Kottler and C. Chappert, *IEEE transactions on magnetics* 34, 1027-1029 (1998)
- [110] J. Kimling, T. Gerhardt, A. Kobs, A. Vogel, S. Wintz, Mi-Young Im, P. Fischer, H. P. Oepen, U. Merkt and G. Meier, *Journal of Applied Physics* 113, 163902 (2013)
- [111] A. Aziz, S. J. Bending, H. G. Roberts, S. Crampin, P. J. Heard and C. H. Marrows, *Physical review letters* 97, 206602 (2006)
- [112] A. Aziz, S. J. Bending, H. Roberts and S. Crampin, *Journal of applied physics* 99, 08C504 (2006)
- [113] K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner and U. Gösele, *Applied Physics Letters* 79, 1360-1362 (2001).

- [114] K. Pitzschel, J. Bachmann, S. Martens, J. M. Montero-Moreno, J. Kimling, G. Meier, J. Escrig, K. Nielsch and D. Görlitz, *Journal of Applied Physics* 109, 033907 (2011)
- [115] G. D. Sulka, A. Brzózka and L. Liu, *Electrochimica Acta* 56, 4972-4979 (2011)
- [116] J. H. Lim, A. Rotaru, S. G. Min, L. Malkinski and J. B. Wiley, *Journal of Materials Chemistry* 20, 9246-9252 (2010)
- [117] F. Tejo, N. Vidal-Silva, A. Espejo and J. Escrig, *Journal of Applied Physics* 115, 17D136 (2014)
- [118] P. Landeros, S. Allende, J. Escrig, E. Salcedo and D. Altbira, *Applied Physics Letters* 90, 102501 (2007)
- [119] M. S. Salem, P. Sergelius, R. M. Corona, J. Escrig, D. Görlitz and K. Nielsch, *Nanoscale* 5, 3941-3947 (2013)
- [120] L. Arzuza, R. López-Ruiz, D. Salazar-Aravena, M. Knobel, F. Béron and K. Pirola, *J. Magn. Magn. Mater.* 432 (2017) 309
- [121] J. A. Fernandez-Roldan, A. De Riz, B. Trapp, C. Thirion, M. Vazquez, J.-C. Toussaint, O. Fruchart and D. Gusakova, *Sci. Rep.* 9, 5130 (2019)
- [122] M. Chandra Sekhar, S. Goolaup, I. Purnama and W. S. Lew, *Journal of Applied Physics* 115, 083913 (2014)
- [123] F. Nasirpouri, S.-M. Peighambari-Sattari, C. Bran, E. M. Palmero, E. B. Eguiarte, M. Vazquez, A. Patsopoulos and D. Kechrakos, *Sci. Rep.* 9:9010 (2019)
- [124] E. M. Palmero, C. Bran, R. P. del Real and M. Vázquez, *Nanotechnology* 26, 461001 (2015).
- [125] H. Mohammed, E. V. Vidal, Y. P. Ivanov and J. Kosel, *IEEE Transactions on Magnetics* 52, 1-5 (2016).
- [126] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii and P. Böni, *Science* 323, 915-919 (2009)

- [127] C. Pappas, E. Lelièvre-Berna, P. Falus, P. M. Bentley, E. Moskvin, S. Grigoriev, P. Fouquet and B. Farago, *Phys. Rev. Lett.* 102, 197202 (2009)
- [128] X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nature* 465, 901 (2010)
- [129] S. Heinze, K. von Bergmann, M. Menzel, J. Brede, A. Kubetzka, R. Wiesendanger, G. Bihlmayer and S. Blügel, *Nat. Phys.* 7, 713 (2011)
- [130] N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J. E. Bickel, B. Wolter, K. vonBergmann, A. Kubetzka and R. Wiesendanger, *Science* 341, 636 (2013)
- [131] X. Zhang, M. Ezawa, D. Xiao, G. P. Zhao, Y. Liu and Y. Zhou, *Nanotechnology* 26, 225701 (2015)
- [132] T. Schwarze, J. Waizner, M. Garst, A. Bauer, I. Stasinopoulos, H. Berger, C. Pfleiderer and D. Grundle, *Nat. Mat.* 14, 478–483 (2015)
- [133] L. Kong and J. Zang, *Phys. Rev. Lett.* 111, 067203 (2013)
- [134] S. Schroeter and M. Garst, *Low Temp. Phys.* 41, 817–825 (2015)
- [135] X. C. Zhang, Y. Zhou and M. Ezawab, *Sci. Rep.* 6, 24795 (2016)
- [136] J. Barker and O. A. Tretiakov, *Phys. Rev. Lett.* 116, 147203 (2016)
- [137] I. Purnama, W. L. Gan, D. W. Wong and W. S. Lew, *Sci. Rep.* 5, 10620 (2015)
- [138] P. Lai, G. P. Zhao, H. Tang, N. Ran, S. Q. Wu, J. Xia, X. Zhang and Y. Zhou, *Sci. Rep.* 7, 45330 (2017)
- [139] H. T. Fook, W. L. Gan, I. Purnama and W. S. Lew, *IEEE Trans. Magn.* 51, 1500204 (2015)
- [140] C. Navau, N. Del-Valle and A. Sanchez, *Phys. Rev. B* 94, 184104 (2016)
- [141] F. Garcia-Sanchez, J. Sampaio, N. Reyren, V. Cros and J.-V. Kim, *New J. Phys.* 18, 075011 (2016)
- [142] X. Z. Yu, *Nature Mater.* 10, 106 (2011)
- [143] S. Rohart, *Phys. Rev. B* 88, 184422 (2013)

- [144] R. Keesman, A. O. Leonov, P. van Dielen, S. Buhandt, G. T. Barkema, L. Fritz and R. A. Duine, *Phys. Rev. B* 92, 134405 (2015)
- [145] F. N. Rybakov, *Phys. Rev. B* 87, 094424 (2013)
- [146] F. Zheng, *Phys. Rev. Lett.* 119, 197205 (2017)
- [147] O. V. Pylypovskiy, V. P. Kravchuk, D. D. Sheka, D. Makarov, O. G. Schmidt and Y. Gaididei, *Phys. Rev. Lett.* 114 197204 (2015)
- [148] Y. Gaididei, V. P. Kravchuk and D. D. Sheka, *Phys. Rev. Lett.* 112 257203 (2014)
- [149] V. L. Carvalho-Santos, R. G. Elias, D. Altbir and J. M. Fonseca, *J. Magn. Magn. Mater.* 391 (2015) 179–183
- [150] V. P. Kravchuk, D. D. Sheka, R. Streubel, D. Makarov, O. G. Schmidt and Y. Gaididei, *Phys. Rev. B* 85 144433 (2012)
- [151] J. Otálora, J. López-López, P. Vargas and P. Landeros *Appl. Phys. Lett.* 100 072407 (2012)
- [152] M. Yan, A. Kákay, S. Gliga and R. Hertel *Phys. Rev. Lett.* 104 057201 (2010)
- [153] J. Hagemester, N. Romming, K. von Bergmann, E. Y. Vedmedenko and R. Wiesendanger, *Nat. Commun.* 6:8455 (2015)
- [154] G. Yin, Y. Li, L. Kong, R. K. Lake, C. L. Chien and J. Zang, *Phys. Rev. B* 93, 174403 (2016)
- [155] J. Leliaert, P. Gypens, M. Milosevic, B. Van Waeyenberge, J. Mulders, *J. Phys. D : Appl. Phys.* 52 (2019) 024003
- [156] S. Do. Yi, S. Onoda, N. Nagaosa and J. H. Han, *Phys. Rev. B* 80, 054416 (2009)
- [157] B. Berg and M. Lüscher, *Nucl. Phys. B* 190, 412 (1981)
- [158] M. Stojmenović, A. Nayak, J. Zunić, *Pattern Recognition* 41 (2008) 2503
- [159] J. Zunić, K. Hirota, P. L. Rosin, *Pattern Recognition* 43 (2010) 47.