



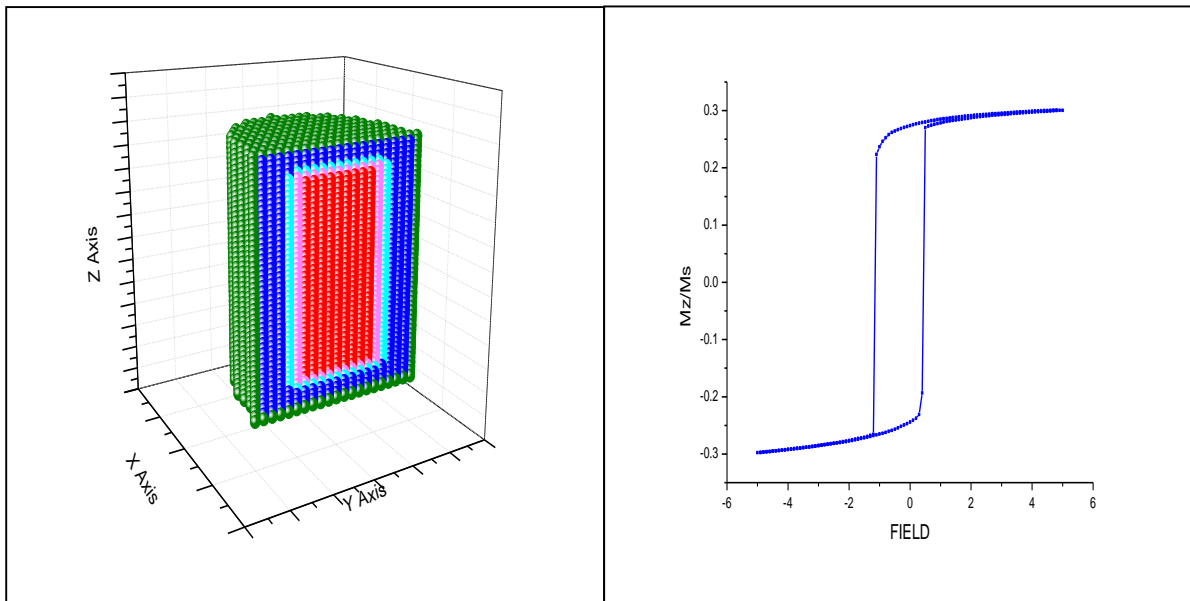
ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ
ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΑΘΗΝΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

**ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟΥ ΠΟΛΩΣΗΣ-ΑΝΤΑΛΛΑΓΗΣ ΣΕ
ΔΙΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑΤΑ**



**ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
ΠΑΤΣΟΠΟΥΛΟΣ ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΗΣ**

ΑΘΗΝΑ 2016



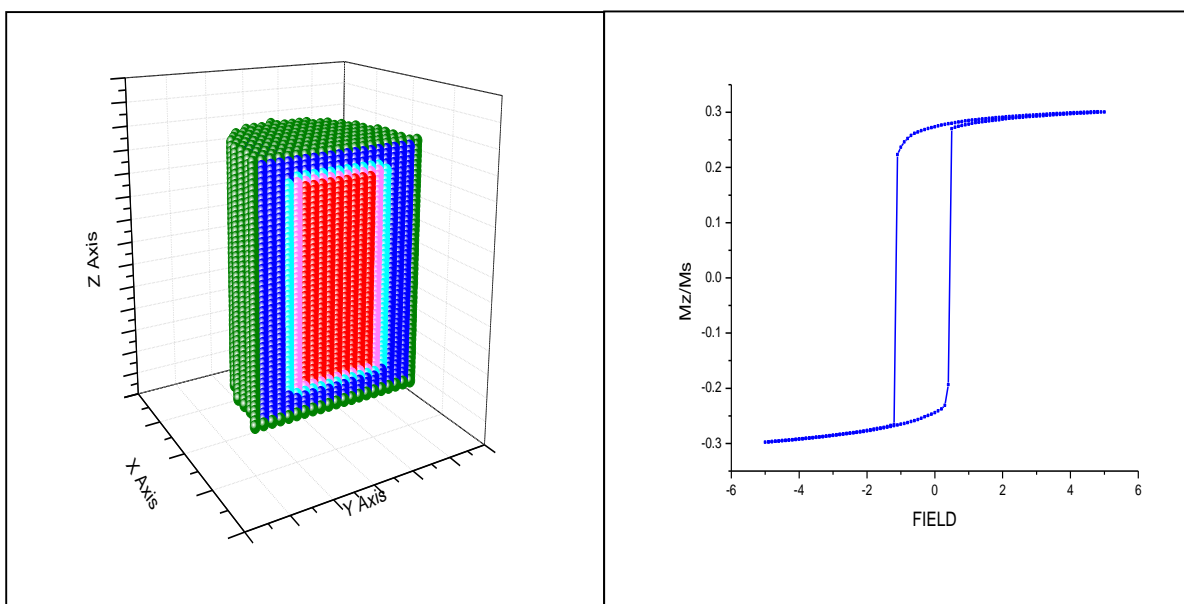
ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ
ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΑΘΗΝΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

**ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟΥ ΠΟΛΩΣΗΣ-ΑΝΤΑΛΛΑΓΗΣ ΣΕ
ΔΙΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑΤΑ**



**ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
ΠΑΤΣΟΠΟΥΛΟΣ ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΗΣ**

ΑΘΗΝΑ 2016

Αφιερώνεται στην οικογένειά μου

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η εργασία αυτή εκπονήθηκε στα πλαίσια της ολοκλήρωσης του προγράμματος μεταπτυχιακών σπουδών, του τμήματος Φυσικής του Ε.Κ.Π.Α, με τίτλο Φυσική των Υλικών. Η ολοκλήρωση 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 Α.Σ.ΠΑΙ.ΤΕ, κ. Κεχράκο Δημήτριο, που ήταν ο κύριος επιβλέπων της εργασίας, για την δυνατότητα που μου έδωσε να εργαστώ στα πλαίσια της ερευνητικής του δραστηριότητας, που άπτεται του αντικειμένου της Υπολογιστικής Φυσικής της Συμπυκνωμένης Ύλης. Η καθοδήγηση του ήταν καθοριστικής σημασίας τόσο για την ολοκλήρωση της εργασίας όσο και για την επιστημονική μου εξέλιξη.

Στη συνέχεια, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Επίκουρο Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του Ε.Κ.Π.Α, κ. Σιμσερίδη Κωσταντίνο, για την τιμή που μου έκανε να αποτελέσει μέλος της τριμελούς επιτροπής της παρούσας εργασίας.

Φυσικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή του τμήματος Φυσικής του Ε.Κ.Π.Α, κ. Τριμπέρη Γεώργιο, για τον καθοριστικής σημασίας επιστημονικό-παιδαγωγικό ρόλο που επιτέλεσε καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου, προπτυχιακών και μεταπτυχιακών. Η πολυετής του καθοδήγηση θα αποτελεί σημείο αναφοράς για όλες τις μελλοντικές επιστημονικές μου δραστηριότητες.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους τους διδάσκοντες αλλά και το προσωπικό του τομέα Φυσικής Στερεάς Κατάστασης του τμήματος Φυσικής του Ε.Κ.Π.Α για το υψηλό επίπεδο διδασκαλίας και την άψογη οργάνωση του προγράμματος μεταπτυχιακών σπουδών.

Τέλος, ευχαριστώ την οικογένειά μου για την στήριξη όλα αυτά τα χρόνια.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ο έλεγχος του σχήματος των μαγνητικών νανοδομών δίνει τη δυνατότητα ελέγχου των μαγνητικών ιδιοτήτων τους, γεγονός που τα καθιστά κατάλληλα υλικά για την κατασκευή σύγχρονων τεχνολογικών διατάξεων. Στην παρούσα εργασία, περιγράφουμε τις μαγνητικές ιδιότητες νανοσυρμάτων στο πλαίσιο της κλασσικής Χαμιλτονιανής Heisenberg και χρησιμοποιούμε τη μέθοδο προσομοίωσης Monte Carlo και τον αλγόριθμο Metropolis, για να μελετήσουμε την εξάρτηση του βρόχου υστέρησης των νανοσυρμάτων από την παράμετρο αναλογίας (μήκος/διάμετρος).

Μελετήσαμε κρυσταλλικά σιδηρομαγνητικά νανοςύρματα (MNΣ) και διμαγνητικά νανοςύρματα (ΔMNΣ) με μορφολογία σιδηρομαγνητικού πυρήνα - αντισιδηρομαγνητικού φλοιού, τα οποία εμφανίζουν το φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής. Εξετάσαμε το μηχανισμό αντιστροφής της μαγνήτισης στα σιδηρομαγνητικά νανοςύρματα και διαπιστώσαμε πως, λόγω των μαγνητοστατικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατομικών spins, η αντιστροφή της μαγνήτισης πραγματοποιείται με σχηματισμό μαγνητικών τοιχωμάτων, που πρωτοεμφανίζονται στα άκρα του νανοςύρματος, διαδίδονται στο εσωτερικό του με σταθερή ταχύτητα και εν συνεχεία συγχωνεύονται, οδηγώντας στην πλήρη αντιστροφή της μαγνήτισης. Παρατηρήσαμε ότι, λόγω των διπολικών αλληλεπιδράσεων έχουμε αρχική αύξηση του συνεκτικού πεδίου (H_c) των μαγνητικών νανοσυρμάτων (σιδηρομαγνητικών και διμαγνητικών) καθώς αυξάνεται το μήκος τους και σταδιακή σταθεροποίηση της τιμής σε μεγάλες τιμές του λόγου αναλογίας. Παρόμοια εξάρτηση από το λόγο αναλογίας, αλλά με μειούμενες τιμές, εμφανίζει και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής (H_{eb}). Επίσης, διερευνήσαμε την επίδραση της ισχύος των διπολικών αλληλεπιδράσεων στη διαμόρφωση του μηχανισμού αντιστροφής της μαγνήτισης στα διμαγνητικά νανοςύρματα και παρατηρήσαμε τη μετάβαση από τη σύμφωνη στροφή ($g \ll K$) στη διάδοση τοιχωμάτων ($g \sim K$), καθώς η ισχύς των αλληλεπιδράσεων αυξάνεται. Τέλος, μελετήσαμε την επίδραση της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας και παρατηρήσαμε ότι οδηγεί σε αύξηση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής, εξαιτίας της αύξησης των μη-ισοσταθμισμένων spins του συστήματος.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ	6
ΠΕΡΙΛΗΨΗ	8
1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	13
1.1 Η ΠΡΟΕΛΕΥΣΗ ΤΟΥ ΜΑΓΝΗΤΙΣΜΟΥ	13
1.2 ΜΑΓΝΗΤΟΣΤΑΤΙΚΕΣ ΔΙΠΟΛΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ	16
1.3 Η ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ HEISENBERG	16
1.4 Η ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΑΝΙΣΟΤΡΟΠΙΑΣ ΤΩΝ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ	20
1.5 ΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΔΙΑΤΑΞΗ ΚΑΙ ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΕΣ ΠΕΡΙΟΧΕΣ	21
1.6 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΑ ΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΑ.....	24
1.6.1 ΣΥΝΘΕΣΗ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΝΑΝΟΥΪΚΩΝ	30
1.6.2 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΝΑΝΟΥΪΚΩΝ.....	34
2 ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟΥ ΠΟΛΩΣΗΣ-ΑΝΤΑΛΛΑΓΗΣ	39
2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	39
2.2 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΩΝ ΜΕΙΚLEJOHN-BEAN.....	41
2.3 Η ΔΙΟΡΘΩΣΗ ΤΟΥ NEEL	50
2.4 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΟΥ MALOZEMOFF.....	51
2.5 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΟΥ MAURI.....	55
2.6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	59
3 ΜΕΛΕΤΗ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΜΟΝTE CARLO	63
3.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΜΟΝTE CARLO.....	63
3.2 ΒΑΣΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ ΚΑΙ ΑΡΧΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΜΟΝTE CARLO	64
3.3 Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΤΟΥ METROPOLIS	66
3.4 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΜΟΝTE CARLO ΓΙΑ ΤΗΝ ΜΕΛΕΤΗ ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΑΝΤΙΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ	69

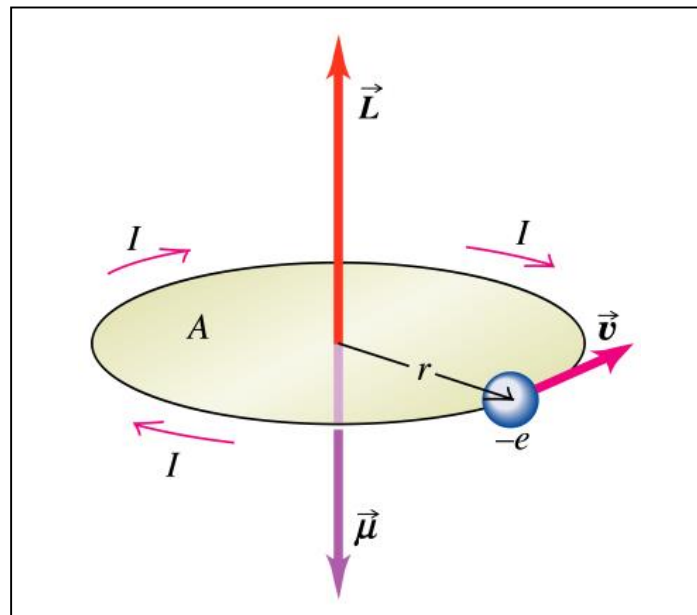
4	ΜΕΛΕΤΗ ΤΩΝ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΥΣΤΕΡΗΣΗΣ ΚΑΙ ΤΟΥ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟΥ ΠΟΛΩΣΗΣ-ΑΝΤΑΛΛΑΓΗΣ ΣΕ ΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑΤΑ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ MMC	79
4.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΑ ΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑΤΑ (ΜΝΣ)	79
4.2	ΜΕΘΟΔΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ	81
4.3	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ-ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	86
4.3.1	ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑ.....	86
4.3.2	ΔΙΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑ	91
4.4	ΣΥΝΟΨΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	96
4.5	ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ.....	97
	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ- ΑΝΑΦΟΡΕΣ	99

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1 Η ΠΡΟΕΛΕΥΣΗ ΤΟΥ ΜΑΓΝΗΤΙΣΜΟΥ

Η θεμελιώδης πηγή του μαγνητισμού είναι οι μαγνητικές ροπές, που δημιουργούνται εντός των ατόμων των υλικών [1, 2, 3, 4, 5]. Στα πλαίσια μια κλασικής προσέγγισης, η μαγνητική ροπή μ 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 $\vec{\mu}$ είναι κάθετη ως προς το επίπεδο της τροχιάς (σχήμα 1.1).



Σχήμα 1.1 Κίνηση ηλεκτρονίου σε ατομική τροχιά σύμφωνα με το ατομικό πρότυπο του Bohr.

Μπορούμε να υπολογίσουμε την μαγνητική ροπή ως εξής,

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

Γράφοντας την μαγνητική ροπή συναρτήσει της στροφορμής $L = mvr$, 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 μέγεθος,

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

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

$$\mu_B = \left(\frac{e\hbar}{2m} \right) = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J / T}. \quad (1.5)$$

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,

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

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

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

όπου, g είναι ο παράγοντας Lande.

Όταν ένα άτομο τοποθετηθεί εντός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, τότε η συνολική μαγνητική του ροπή αλληλοεπιδρά με το μαγνητικό πεδίο. Η ενέργεια της αλληλεπίδρασης αυτής είναι $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}$. Στο άτομο ασκείται μηχανική ροπή $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{H}$, που τείνει να περιστρέψει την μαγνητική ροπή, έτσι ώστε αυτή να ευθυγραμμιστεί με το εξωτερικό πεδίο. Όταν οι μαγνητικές ροπές των ατόμων ευθυγραμμιστούν παράλληλα σε ένα εξωτερικό πεδίο, τότε το υλικό αποκτά μαγνήτιση. Η μαγνήτιση του συστήματος δίνεται από την σχέση,

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

Η μαγνητική επιδεκτικότητα ορίζεται ως,

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

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 ΜΑΓΝΗΤΟΣΤΑΤΙΚΕΣ ΔΙΠΟΛΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

Η ενέργεια της αλληλεπίδρασης μεταξύ δυο μαγνητικών δίπολων δίνεται από την σχέση,

$$U = \frac{1}{r^3} [\vec{\mu}_1 \vec{\mu}_2 - 3(\vec{\mu}_1 \hat{r})(\vec{\mu}_2 \hat{r})]. \quad (1.11)$$

Η μαγνητοστατική αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου είναι μακριάς εμβέλειας και μικρού μέτρου [3, 4, 6]. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές δεν είναι επαρκείς, για να εξηγήσουμε μαγνητικά φαινόμενα, όπως η μαγνητική τάξη. Τέτοια φαινόμενα μπορούν να εξηγηθούν μέσω των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, που πηγάζουν από την απαγορευτική αρχή του Pauli και περιγράφονται ως αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής.

1.3 Η ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ HEISENBERG

Ο Heisenberg χρησιμοποίησε την κβαντική μηχανική, για να υπολογίσει την αλληλεπίδραση ανταλλαγής μεταξύ δυο ατόμων (που εξαρτάται από τον προσανατολισμό των spin)[1, 2, 3].

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

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

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

Το συνολικό σύστημα περιγράφεται από την εξίσωση,

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

ενώ, αφού τα άτομα είναι πανομοιότυπα μπορούμε να εναλλάσσουμε τους δείκτες n και m ,

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

Το πρόβλημα ιδιοτιμών του συστήματος μπορεί να γραφεί ως εξής,

$$H\Psi = E\Psi$$

με

$$H = H_0^1 + H_0^2$$

$$E = E_n + E_m$$

και

$$\Psi = \Psi_1 = \Psi_n(\vec{\tau}_1)\Psi_m(\vec{\tau}_2)$$

$$\Psi = \Psi_2 = \Psi_m(\vec{\tau}_1)\Psi_n(\vec{\tau}_2)$$

Παρατηρούμε πως το σύστημα των δυο ατόμων είναι διπλά εκφυλισμένο. Θεωρώντας την αλληλεπίδραση Coulomb, $V^{1,2} = V(|\vec{\tau}_1 - \vec{\tau}_2|)$, 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,

$$E_{\pm} = E_{mn} + K_{mn} \pm J_{mn} \quad (1.16)$$

με,

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

Και

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

Βλέπουμε πως, λόγω της αλληλεπίδρασης Coulomb, αίρεται ο εκφυλισμός. Η κυματοσυναρτήσεις που διαγωνοποιούν την καινούρια Χαμιλτονιανή είναι οι,

$$\Psi^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + \Psi_2) \quad (\text{συμμετρική κυματοσυνάρτηση})$$

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

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

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

$$X_1^{-1} = |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$X_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]$$

$$X_1^1 = |\uparrow\uparrow\rangle$$

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

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

$$\Psi_{o\lambda}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2)X_0^0 \quad (1.17)$$

$$\Psi_{o\lambda}^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2)X_1^{M_s} \quad (1.18)$$

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

Γνωρίζουμε πως,

$$\vec{S}_1 \vec{S}_2 = \begin{cases} -\frac{3}{4}, S = 0 \\ +\frac{1}{4}, S = 1 \end{cases}$$

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

$$E_{\pm} = (E + K - \frac{1}{2}J) - 2J\vec{S}_1 \vec{S}_2. \quad (1.19)$$

Ο τελευταίος όρος της εξίσωσης (1.19) ονομάζεται Χαμιλτονιανή Heisenberg,

$$H_H = -2J\vec{S}_1 \vec{S}_2. \quad (1.20)$$

Ο συντελεστής J ονομάζεται ολοκλήρωμα ανταλλαγής και εξαρτάται από την απόσταση των δυο ατόμων. Για $J > 0$, η χαμηλότερη ενέργεια του συστήματος είναι η E^- με $S=1$, που αντιστοιχεί σε διάταξη ομοπαράλληλων spin. Η διάταξη αυτή ονομάζεται σιδηρομαγνητική. Για $J < 0$, η χαμηλότερη ενέργεια του συστήματος αντιστοιχεί σε διάταξη αντιπαράλληλων spin, που ονομάζεται αντισιδηρομαγνητική.

Γενικεύοντας για όλα τα άτομα του κρυσταλλικού πλέγματος, η Χαμιλτονιανή Heisenberg γράφεται,

$$H_H = -\sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j . \quad (1.21)$$

Τέλος, απλοποιώντας το πρόβλημα σύμφωνα με την προσέγγιση του ισχυρά δέσμιου ηλεκτρονίου προκύπτει,

$$H_H = -J \sum_i \sum_j \vec{S}_i \vec{S}_j . \quad (1.22)$$

1.4 Η ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΑΝΙΣΟΤΡΟΠΙΑΣ ΤΩΝ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Σε κάθε υλικό υπάρχουν καθορισμένοι άξονες συμμετρίας (easy axis), όπου ελαχιστοποιείται η ενέργεια του συστήματος, αν η μαγνήτιση είναι προσανατολισμένη παράλληλα με αυτούς [3, 4, 5, 6]. Για να στραφεί η μαγνήτιση ως προς αυτούς τους άξονες (έστω κατά γωνία θ), απαιτείται ενέργεια που ονομάζεται ενέργεια ανισοτροπίας. Οι πιο συνηθισμένες αιτίες εμφάνισης ανισοτροπίας στα κρυσταλλικά υλικά, είναι οι εξής:

1. Η αλληλεπίδραση των μαγνητικών ροπών spin με την τροχιακή στροφορμή που οδηγεί στην λεγομένη κρυσταλλική ανισοτροπία.
2. Ανισοτροπία λόγω παραμορφωτικών τάσεων που προκαλούν θλίψεις και εφελκυσμούς στο κρυσταλλικό πλέγμα.
3. Η ύπαρξη (ελεύθερων ή εσωτερικών) επιφανειών σε ένα δείγμα κρυστάλλου και η μειωμένη συμμετρία του συστήματος σε αυτές τις περιοχές, οδηγεί στη λεγόμενη επιφανειακή ανισοτροπία.
4. Το σχήμα ενός πεπερασμένου μαγνητικού δείγματος επιβάλλει συγκεκριμένη μορφή για το απομαγνητίζον πεδίο (demagnetizing field), το οποίο καθορίζει την κατεύθυνση της μαγνήτισης του δείγματος και οδηγεί στη λεγόμενη ανισοτροπία σχήματος (shape anisotropy).

1.5 ΜΑΓΝΗΤΙΚΗ ΔΙΑΤΑΞΗ ΚΑΙ ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΕΣ ΠΕΡΙΟΧΕΣ

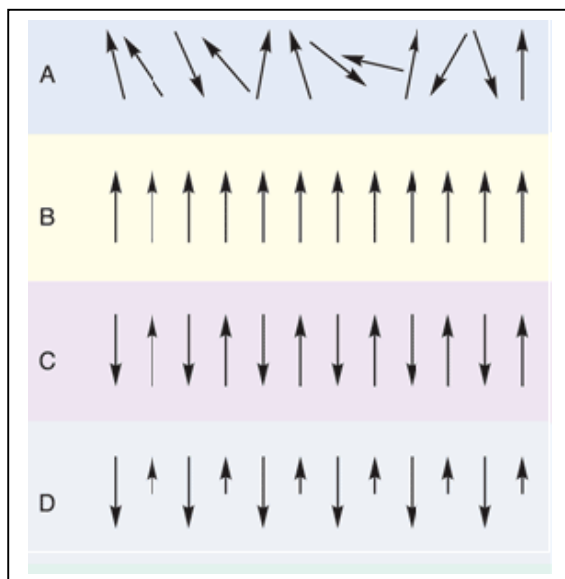
Μεταξύ των μαγνητικών ροπών ενός μαγνητικού υλικού, αναπτύσσονται ισχυρές αλληλεπιδράσεις (ανταλλαγής) [1, 2, 3, 5]. Αποτέλεσμα αυτών των αλληλεπιδράσεων, είναι η δημιουργία μιας συλλογικής ευθυγράμμισης των μαγνητικών ροπών, ακόμα και απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, με την προϋπόθεση η θερμοκρασία να βρίσκεται κάτω από μια κρίσιμη τιμή. 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 κράματα 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 Χρόμιο (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 οξειδία των μετάλλων μετάβασης (Fe_2O_3 , NiO, CoO). Οι διάφορες μορφές μαγνητικής διάταξης απεικονίζεται στο σχήμα 1.2.

Πρέπει να τονίσουμε, πως τα σιδηρομαγνητικά υλικά, σε μακροσκοπικά δείγματα, δηλαδή 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 σιδηρομαγνητικές (domains).

Ο διαχωρισμός των σιδηρομαγνητικών περιοχών δεν γίνεται απότομα, αλλά με έναν συνεχή τρόπο (σχήμα 1.3). 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 σιδηρομαγνητικών περιοχών δεν

είναι απειροστά μικρό, αλλά έχει κάποιο πεπερασμένο πάχος και ονομάζεται τοίχωμα Bloch (domain wall).



Σχήμα 1.2 Μορφές Μαγνητικής Διάταξης:

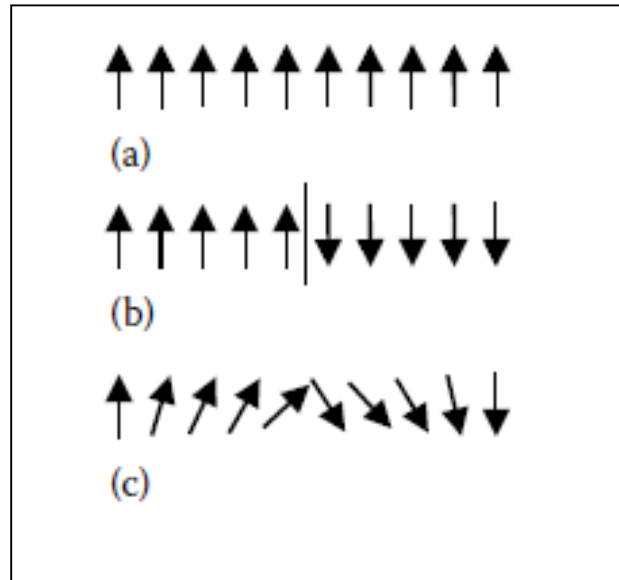
- A. Παραμαγνητισμός
- B. Σιδηρομαγνητισμός
- C. Αντισιδηρομαγνητισμός
- D. Σιδηριμαγνητισμός

Η μεταβολή του spin κατά μια μικρή γωνία φ οδηγεί σε αύξηση της ενέργειας ανταλλαγής κατά $JS^2\varphi^2$. Επομένως, για να στραφεί το spin κατά γωνία $\varphi=\pi/N$ ($\varphi_0=\pi$), απαιτείται ενέργεια $JS^2(\pi/N)^2$. Η ενέργεια που απαιτείται για να στραφεί η μαγνήτιση κατά γωνία π , δηλαδή να πραγματοποιηθούν και οι N στροφές είναι,

$$E_{xc} = NJS^2 \left(\frac{\pi}{N} \right)^2 = \frac{JS^2\pi^2}{N}. \quad (1.23)$$

Αν a είναι η πλεγματική σταθερά, τότε η ενέργεια του τοιχώματος ανά μονάδα επιφάνειας, δίνεται από την σχέση,

$$\varepsilon = \frac{JS^2\pi^2}{N\alpha^2} + KN\alpha.$$



Σχήμα 1.3 Μονοδιάστατο σύστημα σιδηρομαγνητικού υλικού:

- a) Σιδηρομαγνητική διάταξη.
- b) Γειτονικές σιδηρομαγνητικές περιοχές.
- c) Σταδιακή μετάβαση από τη μια σιδηρομαγνητική περιοχή στην άλλη (τοίχωμα Bloch).

Η ενέργεια αυτή γίνεται ελάχιστη όταν,

$$N = \left(\frac{JS^2\pi^2}{K\alpha^3} \right)^{1/2}.$$

Το εύρος του τοιχώματος Bloch, υπολογίζεται τελικά από την σχέση,

$$d = N\alpha = \left(\frac{JS^2\pi^2}{K\alpha} \right)^{1/2}. \quad (1.24)$$

Παρατηρούμε, ότι το εύρος του τοιχώματος είναι αντιστρόφως ανάλογο με τη (ρίζα) της μαγνητικής ανισοτροπίας. Κατά συνέπεια, είναι μεγάλο σε μαλακά μαγνητικά υλικά (μικρό K) και μικρό σε σκληρά μαγνητικά υλικά (μεγάλο K). Τυπικά μεγέθη τοιχώματος Bloch είναι 10nm έως 1μm.

1.6 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΑ ΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΑ

Τα μαγνητικά νανοσωματίδια, είναι σωματίδια πολύ χαμηλών διαστάσεων (τυπικό μέγεθος 10-100 nm), που προκύπτουν από μαγνητικά υλικά με φυσικές ή χημικές μεθόδους [6]. Εξαιτίας των μικρών τους διαστάσεων, τα σωματίδια αυτά έχουν διαφορετικές ιδιότητες από τα συμβατικά μαγνητικά υλικά. Η βασική τους διαφορά είναι η απουσία των σιδηρομαγνητικών περιοχών (single domain nanoparticle), καθώς λόγω του μικρού τους μεγέθους προτιμάται ενεργειακά αυτή η δομή. Ένα μαγνητικό νανοσωματίδιο εμφανίζει στη φυσική του κατάσταση μαγνήτιση (Neel 1949, [6, 7]), αφού όλες οι μαγνητικές ροπές του συστήματος είναι προσανατολισμένες προς την ίδια κατεύθυνση. Παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, οι μαγνητικές ροπές προσανατολίζονται στο πεδίο με ένα σύμφωνο τρόπο (coherent rotation), δηλαδή, κατά την περιστροφή, παραμένουν μεταξύ τους παράλληλες (Stoner-Wohlfarth 1948, [6, 8]).

Θεωρούμε νανοσωματίδιο ανισοτροπίας K , όπου ο z -άξονας λαμβάνεται ως ο άξονας εύκολης μαγνήτισης του συστήματος. Το σύστημα τοποθετείται εντός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, που σχηματίζει γωνία θ_0 με τον z -άξονα, ενώ η μαγνητική ροπή του σωματιδίου M_s , σχηματίζει γωνία θ με το εξωτερικό πεδίο H , όπως φαίνεται στο σχήμα 1.4 (a). Η ενεργειακή πυκνότητα του συστήματος δίνεται από την σχέση,

$$u = -K \cos^2(\theta - \theta_0) - \mu_0 H M_s \cos \theta. \quad (1.25)$$

Στην κατάσταση ισορροπίας ισχύει ότι,

$$\frac{du}{d\theta} = 0 \Rightarrow 2K \sin(\theta - \theta_0) \cos(\theta - \theta_0) + \mu_0 H M_s \sin \theta = 0 \quad (1.26)$$

Εισάγοντας το αδιάστατο πεδίο $h = \frac{H}{H_a}$ και το πεδίο ανισοτροπίας $H_a = \frac{2K}{\mu_0 M_s}$, η εξίσωση (1.27) μετασχηματίζεται στην,

$$\sin[2(\theta - \theta_0)] + 2h \sin \theta = 0 \quad (1.27)$$

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

$$2m(1 - m^2)^{1/2} \cos 2\theta_0 + \sin 2\theta_0 (1 - 2m^2) + 2h(1 - m^2)^{1/2} = 0 \quad (1.28)$$

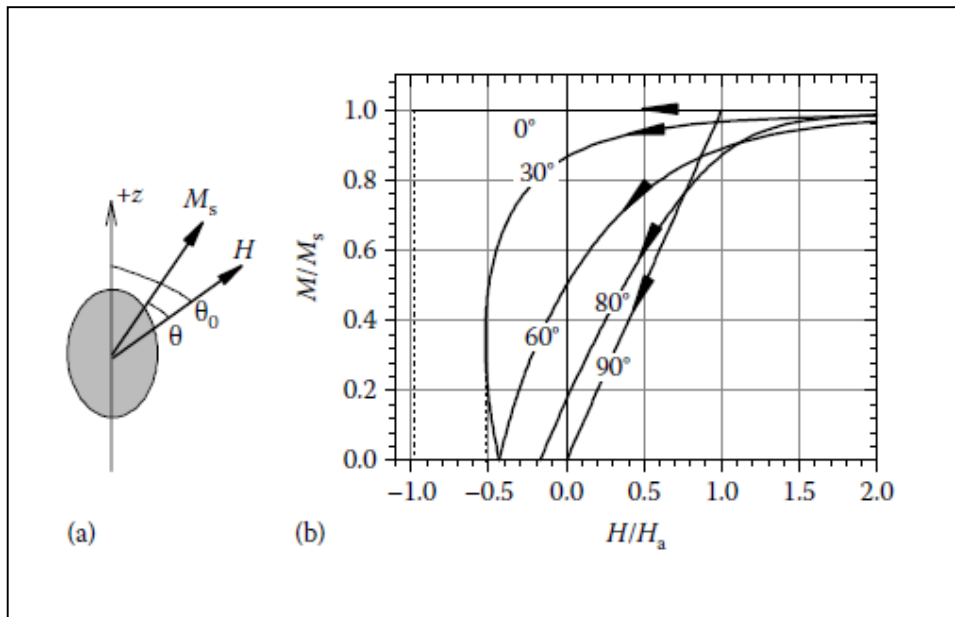
Από την τελευταία σχέση, υπολογίζουμε την παραμένουσα μαγνήτιση ($h=0$) και το συνεκτικό πεδίο ($m=0$) του συστήματος. Προκύπτει ότι,

$$m_r = \cos \theta_0 \quad (1.29)$$

Και

$$h_c = \sin \theta_0 \cos \theta_0. \quad (1.30)$$

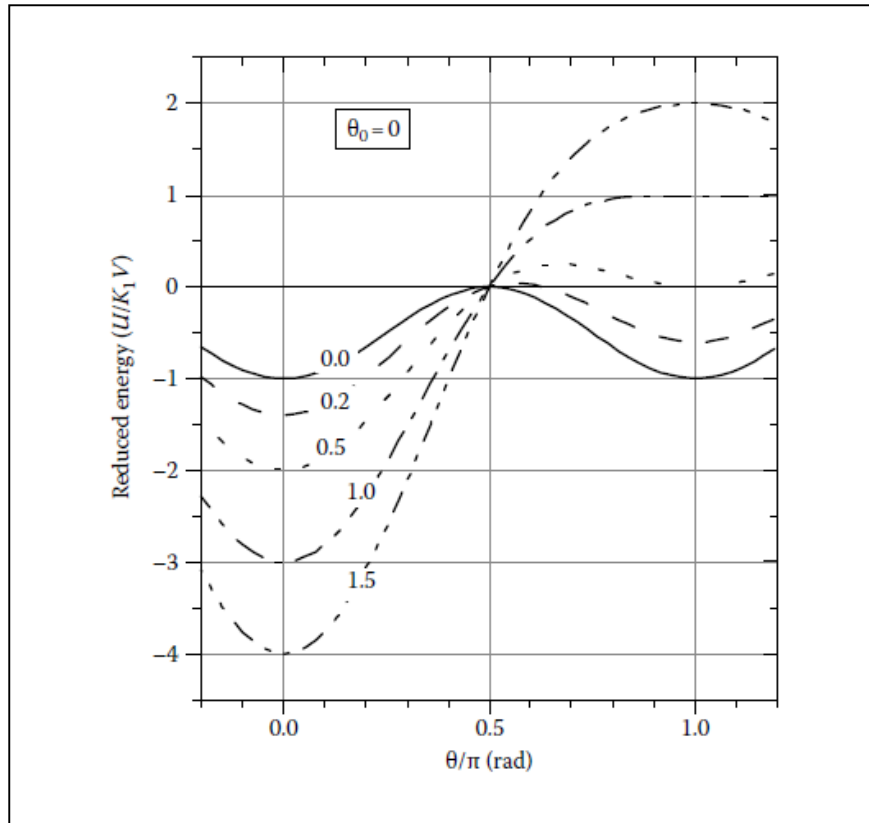
Στο σχήμα 1.4 (b) απεικονίζεται ο βρόχος υστέρησης για διαφορετικές διευθύνσεις εξωτερικού πεδίου.



Σχήμα 1.4 (a) Απεικόνιση μαγνητικού νανοσωματιδίου ανισοτροπίας K , εντός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου που σχηματίζει γωνία θ_0 με τον z -άξονα (άξονα εύκολης μαγνήτισης). (b) Διάγραμμα μαγνήτισης συναρτήσει του εξωτερικού πεδίου για διάφορες διευθύνσεις του πεδίου, σύμφωνα με το μοντέλο S-W [6].

Παρατηρούμε 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 ($\theta = \pi$) 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 σχήμα 1.5, απεικονίζεται το διάγραμμα της ολικής ενέργειας του συστήματος συναρτήσει της γωνίας θ , για διάφορες τιμές του πεδίου h .

Παρατηρούμε πως 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 ενεργειακά ελάχιστο ($\theta=\pi$) εξαφανίζεται και το σύστημα μεταβαίνει στο ελάχιστο που αντιστοιχεί στη διεύθυνση $\theta=0$.



Σχήμα 1.5 Διάγραμμα της ολικής ενέργειας του συστήματος, συναρτήσει της γωνίας θ για διάφορες τιμές του πεδίο h [2].

Η κατάσταση, δηλαδή, στην οποία $H=H_s$, είναι κατάσταση ασταθούς ισορροπίας. Ισχύει ότι,

$$\frac{du}{d\theta} = 0 \Rightarrow \sin[2(\theta - \theta_0)] + 2h \sin \theta = 0 \quad (1.31)$$

Και

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} = 0 \Rightarrow \cos[2(\theta - \theta_0)] \pm h \sin \theta = 0 \quad (1.32)$$

Από τις σχέσεις αυτές υπολογίζουμε το πεδίο αντιστροφής. Προκύπτει,

$$h_s = \frac{H_s}{H_a} = \left(\cos^{2/3} \theta_0 + \sin^{2/3} \theta_0 \right)^{-3/2}. \quad (1.33)$$

Συγκρίνοντας τις σχέσεις (1.30) και (1.33), παρατηρούμε 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 νανοσωματίδιο 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).

Σε πεπερασμένη θερμοκρασία ($T > 0$), η διεύθυνση της μαγνήτισης διακυμαίνεται με τυχαίο τρόπο, ενώ το μέτρο της παραμένει σταθερό [6] και ίσο με τη μαγνήτιση κόρου του σωματιδίου. Το νανοσωματίδιο συμπεριφέρεται σαν ένα γιγάντιο μόριο με μεγάλη μαγνητική ροπή $M \sim N\mu_B$, όπου N είναι ο αριθμός των ατόμων που αποτελούν το νανοσωματίδιο.

Όταν η θερμοκρασία ξεπεράσει μια οριακή τιμή, τέτοια ώστε οι θερμικές διακυμάνσεις ($E_{th} \sim k_B T$) της μαγνήτισης να επιτρέπουν την υπερπήδηση του ενεργειακού φραγμού που θέτει η ενέργεια ανισοτροπίας ($E_{an} \sim KV$), το νανοσωματίδιο αποκτά παραμαγνητική συμπεριφορά ανάλογη με τα συμβατικά παραμαγνητικά υλικά. Η διαφορά έγκειται στο ότι, η μαγνητική ροπή του νανοσωματιδίου είναι χιλιάδες φορές μεγαλύτερη από τη ροπή ενός ατόμου παραμαγνητικού υλικού, γιατί κατά την θερμική διακύμανση της μαγνήτισης διατηρείται η σύμφωνη κατάσταση της μαγνήτισης του νανοσωματιδίου. Το φαινόμενο ονομάζεται **υπερπαραμαγνητισμός** (superparamagnetism) και η οριακή θερμοκρασία πάνω από την οποία παρατηρείται, ονομάζεται **θερμοκρασία φραγμού** (blocking temperature, T_B) του νανοσωματιδίου.

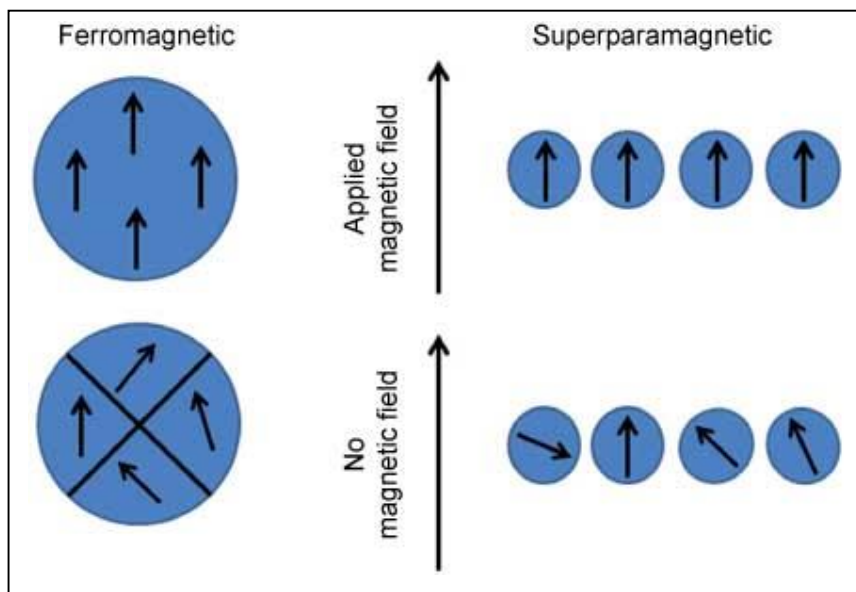
Θεωρούμε πως ο χρόνος εφησυχασμού του συστήματος, δίνεται από τον νόμο του Arrhenius,

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{K_1 V}{k_B T}\right). \quad (1.34)$$

Η οριακή θερμοκρασία εμφάνισης της υπερπαραμαγνητικής συμπεριφοράς του συστήματος, υπολογίζεται από την σχέση,

$$T_b = \frac{K_1 V}{\ln\left(\frac{\tau_m}{\tau}\right) k_B} \quad (1.35)$$

όπου, $\tau \sim 10^{-10}$ s (κατά Néel) και η τιμή τ_m εξαρτάται από την πειραματική διαδικασία. Παραδείγματος χάριν, για νανοσωματίδια Fe ($K \sim 10^5 \text{erg/cm}^3$) με διάμετρο 10nm η dc μαγνητομετρία ($\tau_m \sim 100$ s) προβλέπεται να δώσει $T_B = 15^0\text{K}$.



Σχήμα 1.6 Η υπερπαραμαγνητική συμπεριφορά συλλογής μαγνητικών νανοσωματιδίων.

Εξαιτίας των υψηλών μαγνητίσεων των νανοσωματιδίων, το σύστημα ανταποκρίνεται έντονα ακόμα και σε ασθενή εξωτερικά μαγνητικά πεδία. Για εξωτερικά πεδία της τάξεως $H \sim 0.1$ T, επιτυγχάνεται η μαγνήτιση κορεσμού του συστήματος.

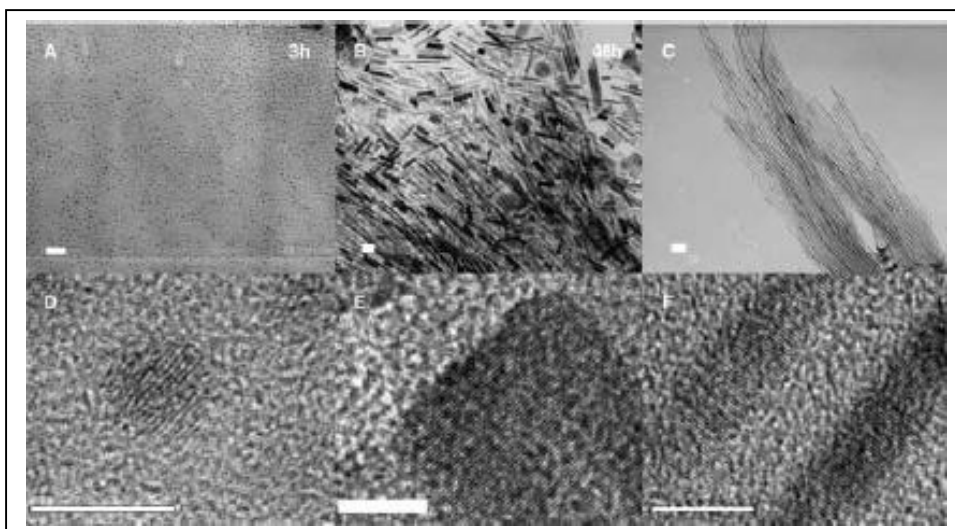
Σε χαμηλές θερμοκρασίες ($k_B T \ll K_1 V$), δεν επιτυγχάνεται θερμική διέγερση πάνω από το φραγμό της ενέργειας ανισοτροπίας, με αποτέλεσμα, το σύστημα να παρουσιάζει φαινόμενα υστέρησης.

Μεταξύ των νανοσωματιδίων που σχηματίζουν μία συλλογή, εμφανίζονται αλληλεπιδράσεις, ανάλογες με εκείνες που εμφανίζονται μεταξύ των ατόμων στα bulk συστήματα [6]. Τέτοιες αλληλεπιδράσεις, είναι οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής, που αναπτύσσονται μεταξύ των επιφανειακών ατόμων δυο γειτονικών νανοσωματιδίων. Ακόμα, σε σωματίδια που βρίσκονται εντός μεταλλικής μήτρας εμφανίζονται έμμεσες αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής ή RKKY, δια μέσου των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας. Τέλος, οι μαγνητοστατικές αλληλεπιδράσεις που είναι ασθενείς και δεν έχουν μεγάλη συνεισφορά στα συμβατικά υλικά (συνήθως δεν συμπεριλαμβάνονται στους θεωρητικούς υπολογισμούς), παίζουν κυρίαρχο ρόλο κατά τη μελέτη των συλλογών αυτών για δυο λόγους. Ο πρώτος λόγος είναι η υψηλή μαγνήτιση των νανοσωματιδίων ($\mu_{MNP} \sim 10^3 \mu_{atom}$), που οδηγεί σε ισχυρές μαγνητοστατικές αλληλεπιδράσεις, ενώ σε συλλογές μικρής πυκνότητας, οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής που είναι μικρής εμβέλειας, δεν έχουν μεγάλη συνεισφορά στις μαγνητικές ιδιότητες του συστήματος με αποτέλεσμα, η επίδραση των μαγνητοστατικών είναι πιο διακριτή.

1.6.1 ΣΥΝΘΕΣΗ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΝΑΝΟΪΛΙΚΩΝ

Υπάρχουν αρκετές μέθοδοι (φυσικές, χημικές, βιολογικές) για την κατασκευή μαγνητικών νανοϋλικών [6]. Μπορούν να χωριστούν σε δυο μεγάλες κατηγορίες, τις top down και τις bottom up μεθόδους. Στις πρώτες, τα μαγνητικά νανοσωματίδια κατασκευάζονται από μακροσκοπικά υλικά με μεθόδους κατακερματισμού, όπως είναι η θερμική αποσύνθεση και η λιθογραφία [10]. Στις δεύτερες, τα σωματίδια αναπτύσσονται ξεκινώντας από το ατομικό επίπεδο και ακολουθώντας μεθόδους χημείας κolloειδών διαλυμάτων ή μεθόδους συμπύκνωσης αερίων σε θαλάμους υπερύψηλού κενού (Ultra-High Vacuum). Μερικές συνηθισμένες χημικές μέθοδοι είναι οι polyol methods, organometallic synthesis, thermolytic methods κ.α. Τα πλεονεκτήματα των μεθόδων

αυτών είναι πως διαμορφώνοντας τις συνθήκες των αντιδράσεων (πχ τη θερμοκρασία, την αρχική συγκέντρωση των αντιδρώντων, την παρουσία καταλυτών), επιτυγχάνουν έλεγχο του μεγέθους και του σχήματος των σωματιδίων. Ακόμα, μπορούν να επιτύχουν την επιθυμητή κρυσταλλική δομή των υλικών, ενώ έχουν χαμηλό κόστος υποδομής. Στο σχήμα 1.7, απεικονίζονται νανοσωματίδια, ράβδοι και νανοσύρματα Κοβαλτίου (Co).

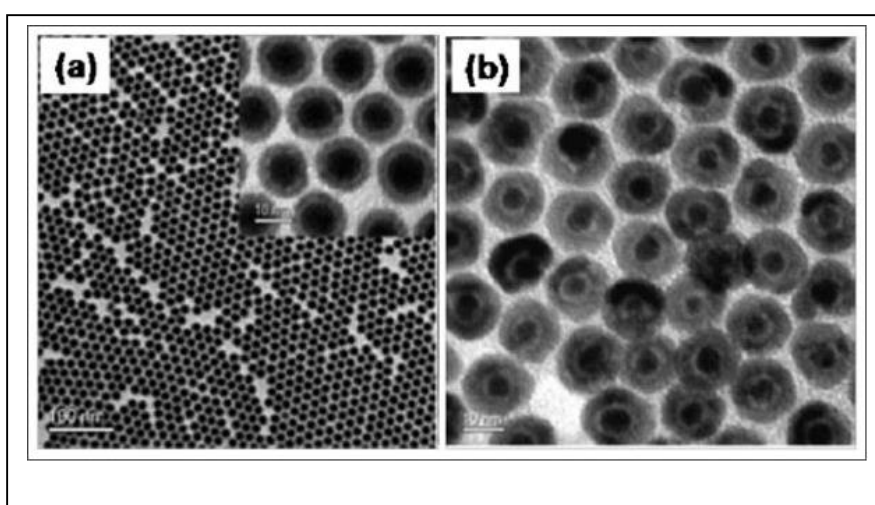


Σχήμα 1.7 Εικόνες ηλεκτρονικής φασματοσκοπίας A) νανοσωματιδίων, B) ράβδων και C) νανοσυρμάτων Κοβαλτίου (Co) [10].

Οι φυσικές μέθοδοι, είναι κυρίως επιταξιακές μέθοδοι και χρησιμοποιούνται για την ανάπτυξη λεπτών υμενίων. Αναφορικά, μερικές συνηθισμένες φυσικές μέθοδοι είναι η Molecular Beam Epitaxy (M.B.E), η Chemical Vapor Deposition (C.V.D), η Pulsed Laser Deposition (P.L.D) κ.α. Τέλος, χρησιμοποιούνται και βιολογικές μέθοδοι, όπου μέσω μικροοργανισμών, όπως το αερόβιο βακτήριο *Actinobacter* spp, επιτυγχάνεται αναγωγή μετάλλων για την κατασκευή μαγνητικών νανοσωματιδίων. Στη συνέχεια, αναφέρονται ορισμένες συνηθισμένες μέθοδοι παρασκευής μαγνητικών νανοϋλικών.

Μέθοδος θερμικής αποσύνθεσης (thermal decomposition): Αξιοποιώντας την μέθοδο αυτή, τα μαγνητικά νανοσωματίδια παράγονται μέσω της αποσύνθεσης οργανομεταλλικών συμπλόκων, μετά από ήπια θέρμανση των υλικών αυτών [11]. Τέτοια υλικά είναι τα μεταλλικά καρβονύλια και τα παράγωγα τους, που χρησιμοποιούνται για

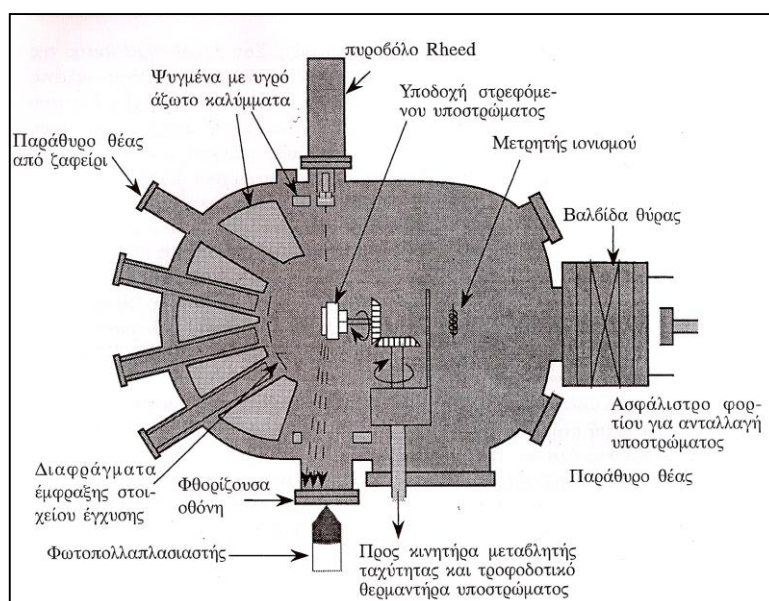
την παραγωγή μεταλλικών νανοσωματιδίων. Καθώς θερμαίνονται αυτά τα υλικά, αποχωρίζεται εύκολα η καρβονυλική ομάδα από τον μεταλλικό πυρήνα, ο οποίος θα χρησιμοποιηθεί για την ανάπτυξη των νανοσωματιδίων. Για παράδειγμα, από την αποσύνθεση του $\text{Fe}(\text{CO})_5$, μπορούν να σχηματιστούν νανοσωματίδια Σιδήρου (Fe) διαμέτρου (5-19) nm. Επίσης, από την αποσύνθεση του $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ κατασκευάζονται νανοσωματίδια Κοβαλτίου (Co). Τα νανοσωματίδια που κατασκευάζονται με τη μέθοδο αυτή, είναι αντιδραστικά και οξειδώνονται ιδιαίτερα γρήγορα. Για να αποφευχθεί η οξείδωση τους, απαιτείται ο σχηματισμός ενός εξωτερικού φλοιού. Στην εικόνα 1.8, απεικονίζεται ο σχηματισμός νανοσωματιδίων Σιδήρου με την μέθοδο θερμικής αποσύνθεσης.



Σχήμα 1.8 Σχηματισμός νανοσωματιδίων Σιδήρου με τη μέθοδο θερμικής αποσύνθεσης. Στην εικόνα (a) απεικονίζεται η ανάπτυξη των νανοσωματιδίων με άμορφο εξωτερικό φλοιό που οδηγεί σε οξείδωση, ενώ στην εικόνα (b) η ανάπτυξη γίνεται παρουσία Me_3NO που δημιουργεί κρυσταλλικό εξωτερικό φλοιό [11].

Μέθοδος μεταλλικής μείωσης (metal reduction): Μαγνητικά νανοσωματίδια κατασκευάζονται με την χρήση αναγωγικών παραγόντων σε μεταλλικά άλατα [11]. Σε αντίθεση με τις μεθόδους θερμικής αποσύνθεσης, τα νανοσωματίδια που παρασκευάζονται με τη μέθοδο αυτή, δεν οξειδώνονται εύκολα. Τέλος, πρέπει να αναφερθεί πως μέσω της μεταλλικής μείωσης, μπορούν να παρασκευαστούν νανοσωματίδια διαφόρων σχημάτων (πχ κυβικά) καθώς και νανοσωματίδια κραμάτων.

Η μέθοδος Molecular Beam Epitaxy (MBE): Η μέθοδος M.B.E ανήκει στις επιταξιακές μεθόδους, όπου η ανάπτυξη των κρυστάλλων γίνεται σε ατομικό επίπεδο χρησιμοποιώντας κάποιο αρχικό υπόστρωμα [12, 13]. Η μηχανή που χρησιμοποιείται σε αυτή τη μέθοδο, αποτελείται από ένα δοχείο ανοξείδωτου χάλυβα διαμέτρου ενός μέτρου. Εσωτερικά του δοχείου επιτυγχάνονται, με τη χρήση μιας σειράς σωλήνων, πολύ μικρές πιέσεις. Στην μία πλευρά υπάρχουν οχτώ, συνήθως, πυρίμαχα κελιά μέσα στα οποία υπάρχει το υλικό για την ανάπτυξη του κρυστάλλου. Τα κελιά αυτά πυρακτώνονται ,έως ότου το υλικό εξαερωθεί . Στη συνέχεια, το αέριο διοχετεύεται δια μέσου στομιών στο δοχείο, όπου και προσκρούει πάνω στο υπόστρωμα. Ο ρυθμός ροής του αερίου ελέγχεται μέσω της θερμοκρασίας. Παράλληλα, παραθυρόφυλλα ελέγχουν την ποσότητα του υλικού που διοχετεύεται, δίνοντας έτσι την δυνατότητα για εναλλαγή του διοχετευόμενου υλικού και τη δημιουργία κραμάτων. Η διάταξη αυτή φαίνεται αναλυτικά και στο σχήμα 1.9.



Σχήμα 1.9 Σχηματικό διάγραμμα του δοχείου ανάπτυξης μιας MBE μηχανής [12, 13].

Η μέθοδος MBE, είναι ίσως η δημοφιλέστερη μέθοδος κατασκευής νανοϋλικών στα ερευνητικά εργαστήρια, εξαιτίας της πολύ καλής κρυσταλλικής ποιότητας των παραγόμενων υλικών αλλά και της δυνατότητας παραγωγής πολύ λεπτών υμενίων. Πέρα όμως από τα πλεονεκτήματά της, η εξάρτησή της από τις συνθήκες κενού, που πρέπει

να επικρατούν εσωτερικά του δοχείου, αλλά και η βραδύτατη ανάπτυξη του κρυστάλλου δυσχεραίνουν την αξιοποίηση της για εμπορική χρήση.

1.6.2 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΝΑΝΟΥΛΙΚΩΝ

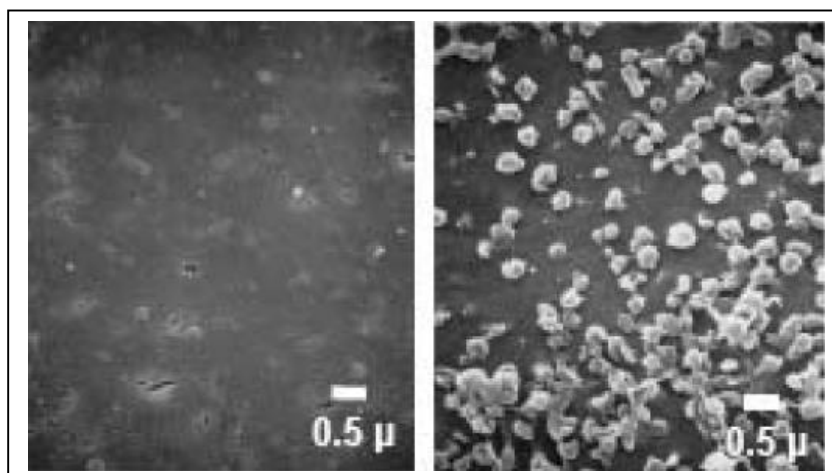
Τα μαγνητικά νανοϋλικά εμφανίζουν ποικίλες εφαρμογές σε αρκετούς επιστημονικούς κλάδους των θετικών επιστημών, όπως της Φυσικής, της Χημείας, της Γεωλογίας αλλά και σε διάφορους κλάδους των επιστημών υγείας, όπως της Φαρμακευτικής και της Ιατρικής. Στην παράγραφο αυτή, θα αναφερθούμε σε ορισμένες σύγχρονες εφαρμογές.

Μαγνητικά μέσα αποθήκευσης πληροφορίας: Εκτός από το πολύ μικρό τους μέγεθος, η μεγάλη κατά μέτρο παραμένουσα μαγνήτιση καθώς και το υψηλό συνεκτικό πεδίο που χαρακτηρίζει τον βρόχο υστέρησης των μαγνητικών νανοϋλικών, τα καθιστά κατάλληλα υλικά για την κατασκευή σύγχρονων μέσων μαγνητικής αποθήκευσης πληροφορίας, όπως οι σκληροί δίσκοι [6, 14]. Αναμένεται πως, με τη χρήση μαγνητικών νανοσωματιδίων διαμέτρου 5 nm σαν ατομικά μαγνητικά bits, η πυκνότητα της αποθηκευμένης πληροφορίας μπορεί να ξεπεράσει τα 1 Tbit/in², δηλαδή, κατά μία τάξη μεγέθους μεγαλύτερη χωρητικότητα από τους συμβατικούς σκληρούς δίσκους. Επίσης, οι σύγχρονες αυτές διατάξεις θα είναι ανθεκτικότερες στην υψηλή θερμοκρασία και στα εξωτερικά μαγνητικά πεδία, ενώ θα έχουν και μεγαλύτερο χρόνο ζωής.

Εφαρμογές στη Βιολογία και την Ιατρική: Τα μαγνητικά νανοϋλικά, μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε πολλές διαγνωστικές αλλά και θεραπευτικές εφαρμογές [10]. Λόγω του μικρού τους μεγέθους, μπορούν να χρησιμοποιηθούν, πέρα από τις *in vitro* (εχτός του σώματος) και σε *in vivo* (εντός του σώματος) εφαρμογές.

Μια από τις κυριότερες εφαρμογές, είναι η ενίσχυση του σήματος και η βελτίωση της απεικόνισης της μαγνητικής τομογραφίας (MRI). Η ενίσχυση αυτή επιτυγχάνεται με τη χρήση υπερπαραμαγνητικών νανοσωματιδίων οξειδίου του Σιδήρου (SPIO). Εξαιτίας της υψηλής τους μαγνήτισης και μαγνητικής επιδεκτικότητας, επιτυγχάνεται πιο αποδοτικά ο εφησυχασμός των πρωτονίων, που είναι ο βασικός φυσικός μηχανισμός της μαγνητικής τομογραφίας.

Ακόμα, νανοσωματίδια, τροποποιημένα με βιοσυμβατά μόρια, μπορούν να εισέλθουν απευθείας στον οργανισμό και να κατευθυνθούν επιλεκτικά σε διάφορα όργανα.



Σχήμα 1.10 Απεικόνιση μαγνητικής τομογραφίας (MRI) των λεμφοκυττάρων. Η πρώτη εικόνα έχει πραγματοποιηθεί με συμβατικές μεθόδους, ενώ στη δεύτερη έγινε χρήση υπερπαραμαγνητικών νανοσωματιδίων [10].

Μια σημαντική εφαρμογή στην Ιατρική, είναι η βελτίωση των θεραπευτικών μεθόδων της χημειοθεραπείας [10]. Με τη χρήση μαγνητικών νανοσωματιδίων, μπορεί να επιτευχθεί μία ομοιόμορφη διάθεση του φαρμάκου καθώς και η τοπική του δράση σε επιλεγμένους ιστούς. Επίσης, είναι δυνατός και ο ελεγχόμενος ρυθμός απελευθέρωσης του φαρμάκου. Αποτέλεσμα αυτών των βελτιώσεων, είναι η σημαντική μείωση των παράπλευρων επιδράσεων των φαρμάκων στον οργανισμό (εξασθένηση ανοσοποιητικού κτλ.).

Τέλος, τα καρκινικά κύτταρα είναι ιδιαίτερα ευπαθή στην αύξηση της θερμοκρασίας. Νανοσωματίδια μπορούν να τοποθετηθούν στην περιοχή των κυττάρων αυτών και μέσω ενός εξωτερικού εναλλασσόμενου μαγνητικού πεδίου, να μεταβάλλουμε την κατεύθυνση της μαγνήτισής τους. Αποτέλεσμα αυτής της μεταβολής της μαγνήτισης, είναι η αύξηση της θερμοκρασίας και η καταστροφή των καρκινικών κυττάρων (υπερθερμία) [10].

Εφαρμογές στην Χημεία: Η μεγάλη ειδική επιφάνεια των νανοσωματιδίων (το 60% των ατόμων βρίσκονται στην επιφάνεια) τα καθιστά κατάλληλα για την χρήση τους σε

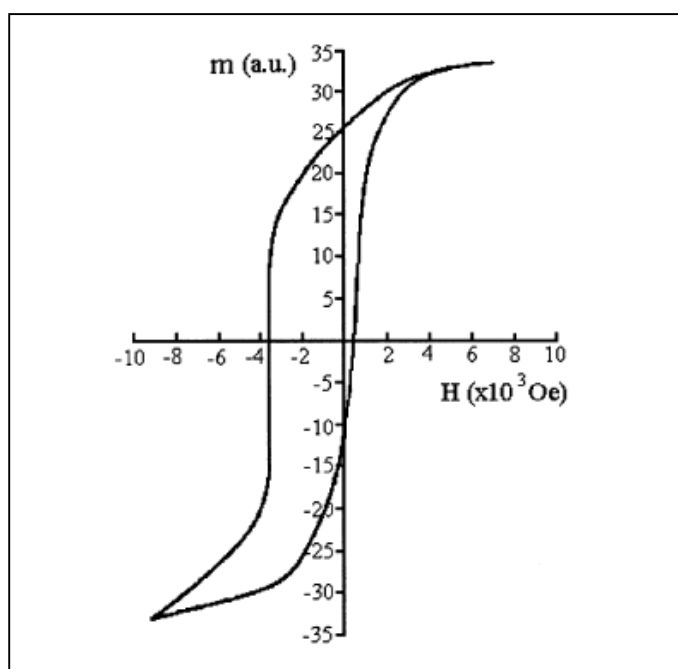
μεθόδους ετερογενούς κατάλυσης. Επίσης, μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον καθαρισμό μολυσμένου νερού από βαρέα μέταλλα [10].

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

2 ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟΥ ΠΟΛΩΣΗΣ-ΑΝΤΑΛΛΑΓΗΣ

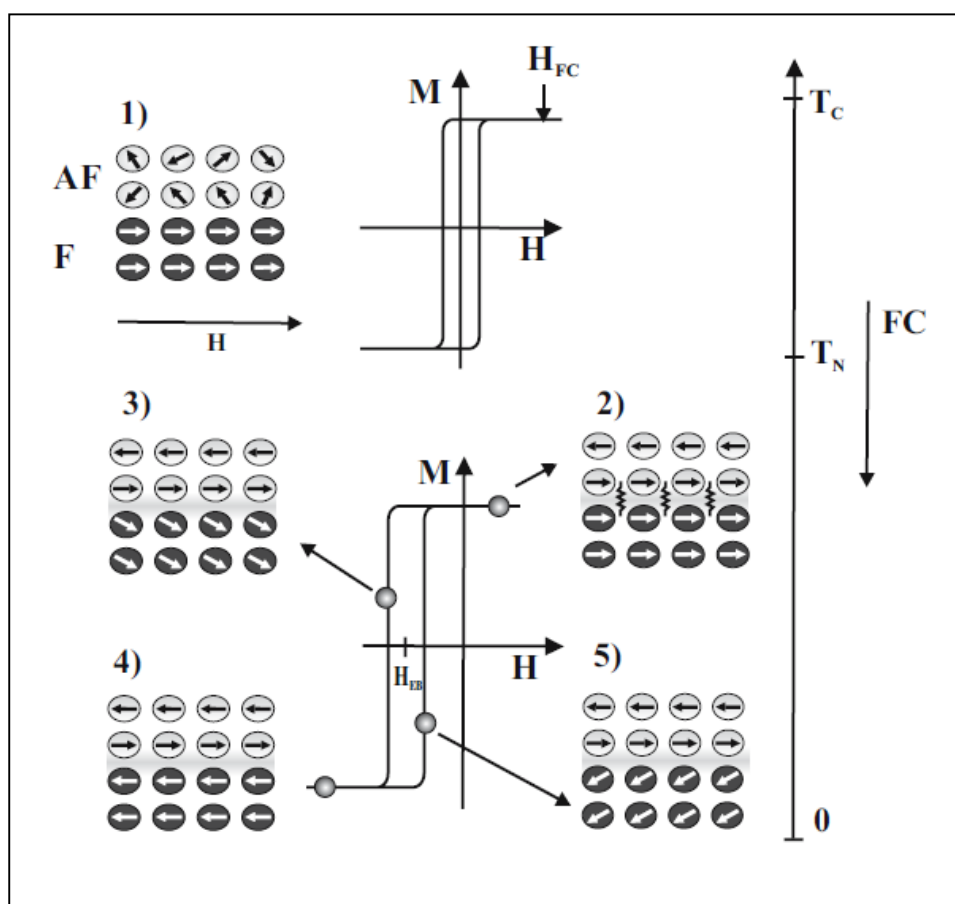
2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Το φαινόμενο πόλωσης-ανταλλαγής (exchange bias effect) παρατηρείται όταν ένα σιδηρομαγνητικό και ένα αντισιδηρομαγνητικό υλικό, βρίσκονται σε μαγνητική σύζευξη, είτε απευθείας, είτε μέσω ενδιάμεσου μη-μαγνητικού υλικού [15, 16, 17]. 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 (field cooling), μετατοπισμένο το βρόχο υστέρησης ενός συστήματος σωματιδίων Co (σιδηρομαγνητικό)-CoO (αντισιδηρομαγνητικό), σχήμα 2.1.



Σχήμα 2.1 Βρόχος υστέρησης σωματιδίων Co-CoO σε θερμοκρασία 77 K [17].

Η ποιοτική κατανόηση του φαινομένου, γίνεται μέσω της μικροσκοπικής περιγραφής της δομής στην διεπιφάνεια των δυο μερών της ετεροδομής καθώς και της φαινομενολογικής περιγραφής της πειραματικής διαδικασίας [15, 16]. Αρχικά, ψύχουμε το σύστημα 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 2.2.1).



Σχήμα 2.2 Μικροσκοπική περιγραφή της διεπιφάνειας ετεροδομής σιδηρομαγνητικού-αντισιδηρομαγνητικού υλικού κατά την μετατόπιση του βρόχου υστέρησης σε πείραμα Field Cooling [15, 19].

Στη συνέχεια, τοποθετούμε το σύστημα εντός ισχυρού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, μέχρις ότου να επιτευχθεί στο σιδηρομαγνητικό υλικό μαγνήτιση κορεσμού και το ψύχουμε σε θερμοκρασία $T < T_N < T_c$ (field cooling procedure). Τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, τώρα, διατάσσονται, ενώ λόγω της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής

(Heisenberg), το πρώτο μονοατομικό στρώμα στην διεπιφάνεια διατάσσεται παράλληλα (ή αντιπαράλληλα) με τα spins του σιδηρομαγνητικού υλικού. Στη συνέχεια, αντιστρέφουμε το μαγνητικό πεδίο. Τα 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 (exchange bias field).

2.2 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΩΝ ΜΕΙΚLEJOHN-BEAN

Οι Meiklejohn και Bean κατασκεύασαν ένα φαινομενολογικό μοντέλο, για τον υπολογισμό του πεδίου πόλωσης-ανταλλαγής [15, 17, 18]. Το μοντέλο τους βασίστηκε στις εξής υποθέσεις:

- Τα spins του σιδηρομαγνητικού υλικού, κατά την ανταπόκριση τους σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, περιστρέφονται σύμφωνα (coherent rotation), σύμφωνα με το μοντέλο των Stoner-Wohlfarth.
- Τα δυο μέρη της ετεροδομής δεν εμφανίζουν σιδηρομαγνητικές περιοχές.
- Η μετάβαση από την σιδηρομαγνητική στην αντισιδηρομαγνητική περιοχή γίνεται ομαλά.
- Το αντισιδηρομαγνητικό υλικό δεν ανταποκρίνεται στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.
- Τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού στην επιφάνεια, έχουν την ίδια κατεύθυνση δημιουργώντας μια επιφανειακή μαγνητική ροπή (uncompensated spins).
- (uncompensated structure).
- Μεταξύ των spins των δυο υλικών στην διεπιφάνεια, εμφανίζονται αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής (Heisenberg) μέτρου J_{eb} .

Οι Meiklejohn και Bean βασίστηκαν σε πειραματικά δεδομένα, για να κατασκευάσουν μια σχέση για την επιφανειακή ενέργεια του συστήματος. Χρησιμοποιώντας μεθόδους μαγνητομέτρίας ροπών (torque magnetometry), υπολόγισαν τη ροπή που δέχονται τα spins της διεπιφάνειας, αν τα στρέψουμε κατά γωνία θ από τον άξονα του εξωτερικού πεδίου. Η σχέση στην οποία κατέληξαν είναι η,

$$T = -J_{eb} \sin \theta \quad (2.1)$$

Μέσω αυτής της σχέσης υπολόγισαν τον ενεργειακό όρο, που οφείλεται στις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής στην διεπιφάνεια ως εξής,

$$T = -\frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta} \Rightarrow E(\theta) = -\int T d\theta = \int J_{eb} \sin \theta d\theta = -J_{eb} \cos \theta + K_0 \quad (2.2)$$

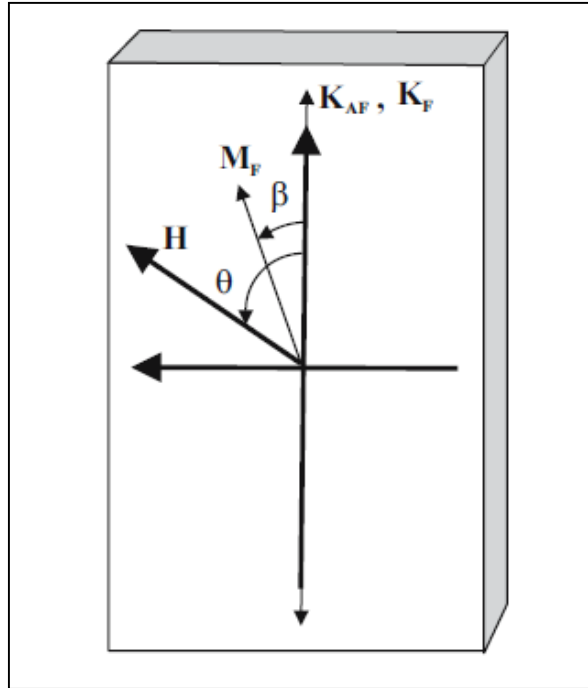
Η συνολική ενέργεια του συστήματος, λοιπόν, είναι,

$$E_A = -\mu_0 H M_F t_F \cos(-\beta) + K_F t_F \sin^2(\beta) - J_{eb} \cos(\beta) \quad (2.3)$$

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 φασεων. Η διάταξη του συστήματος απεικονίζεται στο σχήμα 2.3. Από την συνθήκη ισορροπίας προκύπτει ότι,

$$\frac{\partial E_A(\theta)}{\partial \theta} = 0 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \arccos\left(\frac{J_{eb} - \mu_0 H M_F t_F}{2K_F}\right), \mu_0 H M_F t_F - J_{eb} \leq 2K_F \end{array} \right. \quad (2.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta = \begin{cases} 0 \\ \pi \end{cases}, \mu_0 H M_F t_F - J_{eb} \geq 2K_F \end{array} \right. \quad (2.5)$$



Σχήμα 2.3 Το μοντέλο των Meiklejohn και Bean. Το εξωτερικό πεδίο σχηματίζει γωνία θ από τους easy άξονες ενώ η μαγνήτιση M_F , β [7].

Για $\beta=0$ προκύπτει,

$$H_{c1} = -\frac{2K_F t_F + J_{eb}}{\mu_0 M_F t_F} \quad (2.6)$$

και για $\beta=\pi$ προκύπτει,

$$H_{c2} = \frac{2K_F t_F - J_{eb}}{\mu_0 M_F t_F} \quad (2.7)$$

Το συνεκτικό πεδίο του συστήματος υπολογίζεται από την σχέση,

$$H_c = \frac{-H_{c1} + H_{c2}}{2} = \frac{2K_F}{\mu_0 M_F} \quad (2.8)$$

και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής από την,

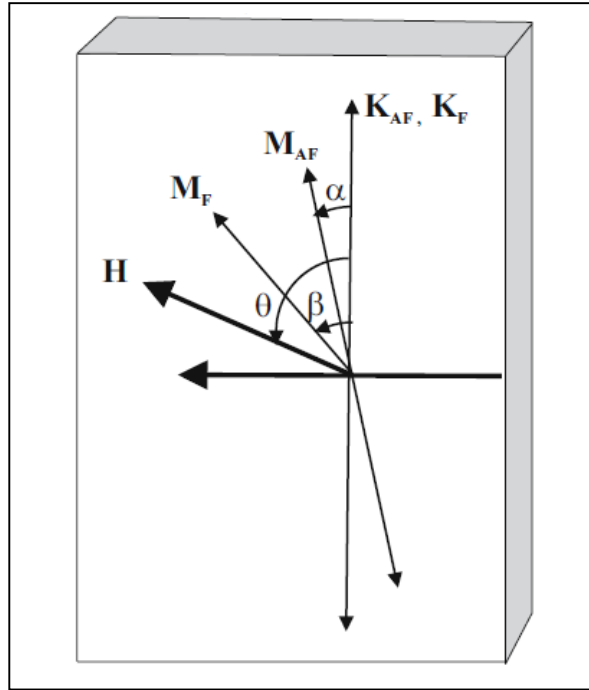
$$H_{eb} = \frac{H_{c1} + H_{c2}}{2} = -\frac{J_{eb}}{\mu_0 M_F t_F} \quad (2.9)$$

Η σχέση (2.9), παρατηρούμε, πως προβλέπει αρνητικό πρόσημο στο πεδίο πόλωσης ανταλλαγής, δηλαδή, αντίθετη ως προς το εξωτερικό πεδίο μετατόπιση του βρόχου υστέρησης.

Στα περισσότερα πειραματικά αποτελέσματα επιβεβαιώνεται η πρόβλεψη αυτή. Υπάρχουν όμως και εξαιρέσεις, όπου παρατηρείται θετική μετατόπιση του βρόχου. Για να εξηγηθούν οι θετικές μετατοπίσεις, θεωρήθηκε πως σε υψηλά πεδία, τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού στην διεπιφάνεια προσανατολίζονται ομοπαράλληλα ως προς το πεδίο και ως προς τα spins του σιδηρομαγνητικού υλικού. Η προτιμητέα, όμως, σύζευξη μεταξύ των spins στην διεπιφάνεια είναι η αντισιδηρομαγνητική. Επομένως, το πρόσημο του όρου J_{eb} είναι αρνητικό, δηλαδή, προκύπτει θετικό πεδίο πόλωσης ανταλλαγής (σχέση 2.9).

Το μοντέλο των Meiklejohn και Bean ερμηνεύει την μετατόπιση του βρόχου υστέρησης, που παρατηρείται στις μαγνητικές ετεροδομές. Παρόλα αυτά, το μοντέλο αποτυγχάνει στους υπολογισμούς του μέτρου του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής. Επίσης, στην σχέση (2.9), το πεδίο H_{eb} προκύπτει αντιστρόφως ανάλογο του πάχους t_F 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.

Οι Meiklejohn και Bean βελτίωσαν το μοντέλο τους εισάγοντας έναν ακόμα βαθμό ελευθερίας στους υπολογισμούς [15, 17]. Υπέθεσαν, πως τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, αλληλεπιδρούν ασθενώς με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, δίνοντας τους τη δυνατότητα να περιστρέφονται με σύμφωνο τρόπο (coherent rotation). Η νέα διάταξη του συστήματος απεικονίζεται στο σχήμα 2.4.



Σχήμα 2.4 Το ρεαλιστικό μοντέλο των Meiklejohn και Bean [15].

Η επιφανειακή ενέργεια του συστήματος δίνεται από την εξίσωση,

$$\begin{aligned}
 E_A = & -\mu_0 H M_F t_F \cos(\theta - \beta) + \\
 & + K_F t_F \sin^2(\beta) + K_{AF} t_{AF} \sin^2(\alpha) \\
 & - J_{eb} \cos(\beta - \alpha)
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Ο τρίτος όρος που προστέθηκε, είναι η ενέργεια ανισοτροπίας του αντισιδηρομαγνητικού υλικού.

Από την ελαχιστοποίηση της ενέργειας ως προς τις γωνίες α και β , προκύπτουν οι εξισώσεις,

$$\frac{H}{H_{eb}^{\infty}} \sin(\theta - \beta) + \sin(\beta - \alpha) = 0 \quad (2.11)$$

$$R \sin(2\alpha) - \sin(\beta - \alpha) = 0 \quad (2.12)$$

όπου,

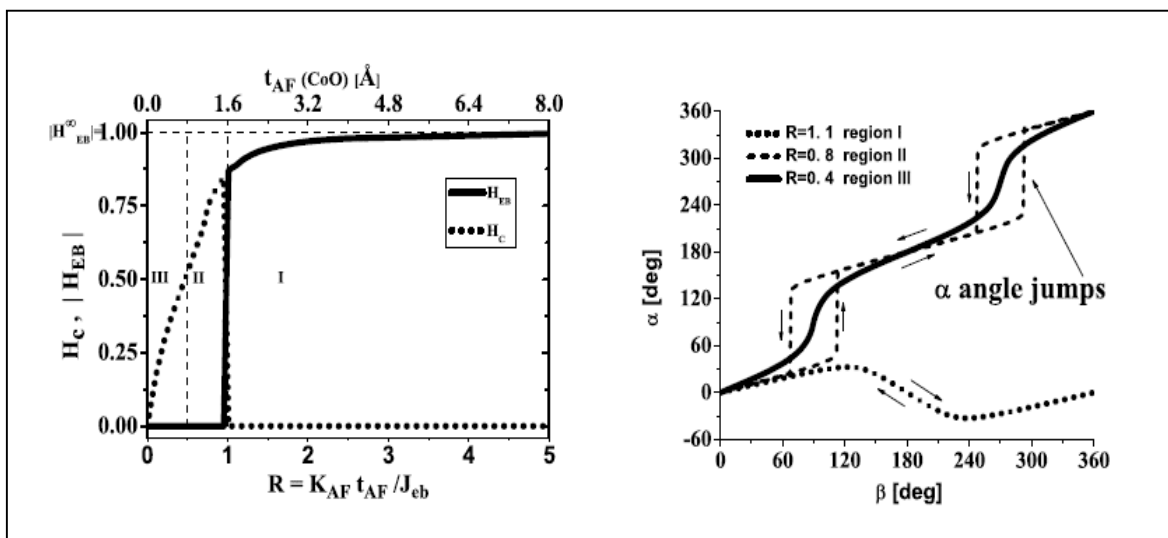
$$H_{eb}^{\infty} \equiv - \frac{J_{eb}}{\mu_0 M_F t_F} \quad (2.13)$$

είναι το πεδίο πόλωσης-ανταλλαγής, όταν η ανισοτροπία K_{AF} τείνει στο άπειρο, και

$$R \equiv \frac{K_{AF} t_{AF}}{J_{eb}} \quad (2.14)$$

είναι η παράμετρος, που προσδιορίζει την αναλογία μεταξύ της ανισοτροπίας του αντισιδηρομαγνητικού υλικού και της επιφανειακής ενέργειας ανταλλαγής. Στις εξισώσεις (2.11) και (2.12) θέσαμε $K_F=0$, δηλαδή, το συνεκτικό πεδίο θα σχετίζεται μόνο με το αντισιδηρομαγνητικό υλικό. Επίσης, έχει μελετηθεί αριθμητικά [15] το σύστημα των εξισώσεων, στην περίπτωση που το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο είναι παράλληλο στους άξονες εύκολης μαγνήτισης ($\theta=0$). Από τους αριθμητικούς υπολογισμούς, προκύπτει η γωνία α συναρτήσει του εξωτερικού πεδίου καθώς και η γωνία β . Μέσω της γωνίας β ,

προσδιορίζουμε τον βρόχο υστέρησης καθώς και τα πεδία H_{c1} και H_{c2} . Από τις σχέσεις (2.8) και (2.9), υπολογίζουμε το συνεκτικό πεδίο H_c και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής H_{eb} . Το σχήμα του βρόχου υστέρησης καθορίζεται από την γωνία α , αφού το φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής εξαρτάται, όπως αναφέρθηκε, από το αντισιδηρομαγνητικό υλικό. Θα μελετήσουμε, λοιπόν, την εξάρτηση του σχήματος του βρόχου υστέρησης από την παράμετρο R .



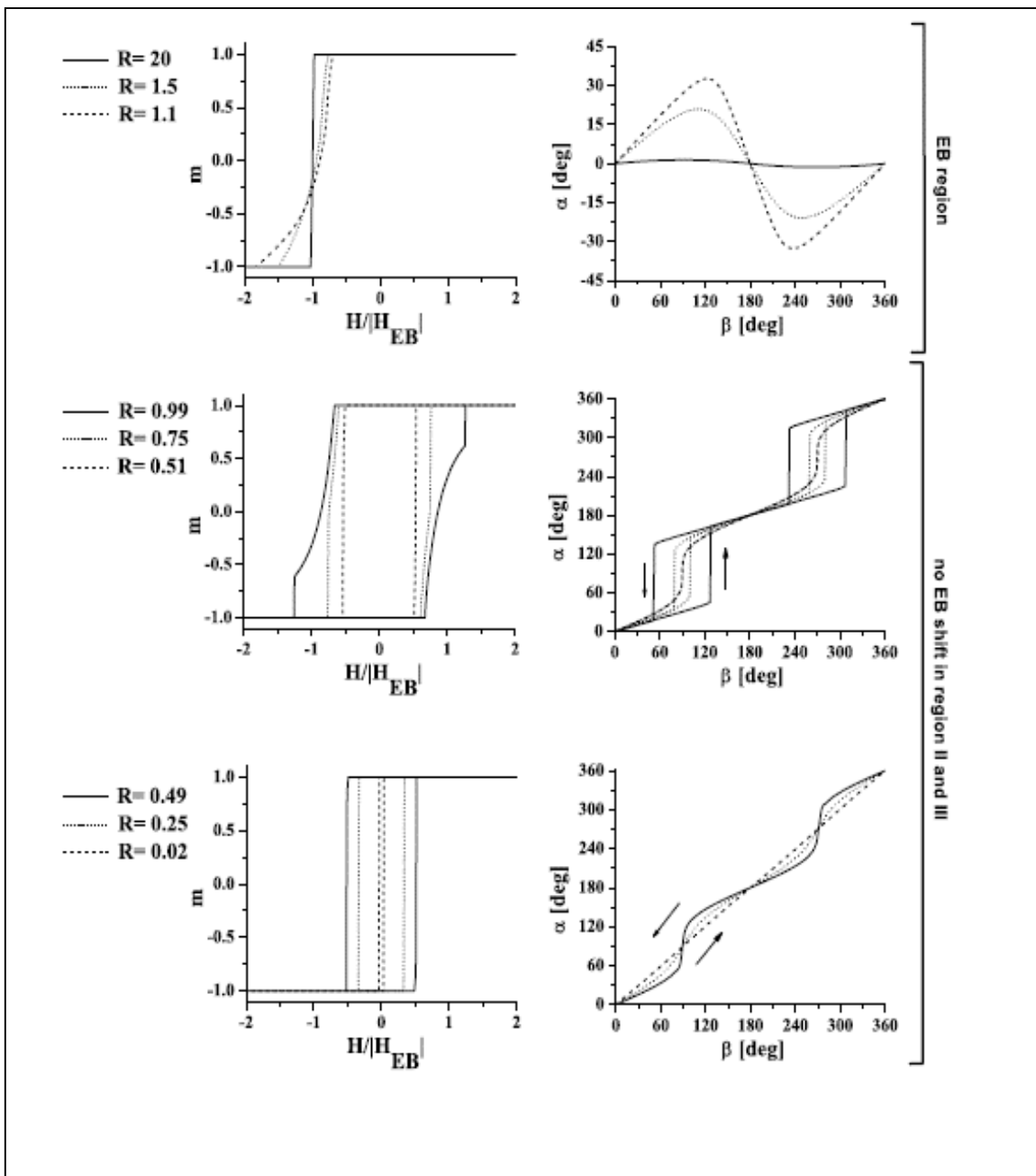
Σχήμα 2.5 Αριθμητικά αποτελέσματα του ρεαλιστικού μοντέλου των Meiklejohn και Bean [15].

- **$R \geq 1$ (exchange bias region):** Σε αυτή την περιοχή το συνεκτικό πεδίο είναι μηδέν, ενώ το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής αυξάνεται ασυμπτωτικά μέχρι την τιμή H_{eb}^∞ , καθώς αυξάνεται η παράμετρος R . Τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού περιστρέφονται σύμφωνα, καθώς περιστρέφονται και τα spins του σιδηρομαγνητικού υλικού. Η μέγιστη γωνία περιστροφής επιτυγχάνεται για $R=1$ και είναι περίπου ίση με $\alpha = 45^\circ$, ενώ για $R \rightarrow \infty$ η γωνία περιστροφής α είναι μηδενική. Τέλος, παρατηρούμε από το σχήμα 2.5 πως η επαναφορά των spins στην αρχική τους θέση γίνεται ακολουθώντας τον ίδιο «δρόμο», δηλαδή, τις ίδιες γωνίες (reversible rotation).
- **$0.5 \leq R < 1$:** Χαρακτηριστικό αυτής της περιοχής, είναι πως τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, μετά την περιστροφή τους, δεν επανέρχονται στις

αρχικές τους θέσεις (irreversible rotation), προκαλώντας έτσι φαινόμενα υστέρησης. Ακόμα, λόγω της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής με τα spins του σιδηρομαγνητικού υλικού, τους ασκούνται ισχυρές ροπές, που οδηγούν σε απότομες μεταβολές της γωνίας α για κάποιες κρίσιμες τιμές της γωνίας β (angle jumps). Επομένως, σε αυτή την περιοχή αυξάνεται το συνεκτικό πεδίο H_c και μηδενίζεται το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής H_{eb} . Τα αποτελέσματα απεικονίζονται και στο σχήμα 2.6. Ο βρόχος υστέρησης σε αυτή την περιοχή έχει τελείως διαφορετικό σχήμα, ενώ δεν παρουσιάζει μετατόπιση.

- **$R < 0.5$:** Σε αυτή την περιοχή, δεν παρατηρούνται οι απότομες μεταβολές της γωνίας α και τα spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού επανέρχονται στις αρχικές τους θέσεις ακολουθώντας τον ίδιο «δρόμο», σχήμα 2.5. Το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής είναι μηδενικό, ενώ το συνεκτικό πεδίο μειώνεται καθώς μειώνεται η παράμετρος R ($R=0 \Rightarrow H_c=0$). Ο βρόχος υστέρησης του συστήματος σε αυτή την περιοχή, είναι παρόμοιος με τον βρόχο υστέρησης ενός σιδηρομαγνητικού (bulk) υλικού.

Συνοψίζοντας, το φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής (μετατόπιση βρόχου υστέρησης) παρατηρείται σε συστήματα, όπου η ενέργεια ανισοτροπίας είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια ανταλλαγής ($K_{AF} > J_{eb}$). Το μέτρο του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής καθώς και του συνεκτικού πεδίου, καθορίζονται από το πάχος, την ανισοτροπία και τις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής των δομικών υλικών της ετεροδομής. Τα αποτελέσματα απεικονίζονται στο σχήμα 2.6.



Σχήμα 2.6 Προσομοίωση των βρόχων υστέρησης και των διευθύνσεων α και β των spins ενός συστήματος μαγνητικής ετεροδομής σιδηρομαγνητικού- αντισιδηρομαγνητικού υλικού σύμφωνα με το ρεαλιστικό μοντέλο των Meiklejohn και Bean [15].

2.3 Η ΔΙΟΡΘΩΣΗ ΤΟΥ NEEL

Η υπόθεση των Meiklejohn και Bean για συνεκτική περιστροφή των spins του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, οδηγεί σε υπερεκτίμηση της μετατόπισης του βρόχου υστέρησης [15, 17, 20]. Για να διορθώσει αυτή τη λανθασμένη εκτίμηση ο Neel, υπέθεσε πως μέρος της ενέργειας ανταλλαγής στην διεπιφάνεια, καταναλώνεται κατά την περιστροφή, στο σχηματισμό περιοχών στο αντισιδηρομαγνητικό υλικό. Ο Neel εφάρμοσε την υπόθεση του στη μελέτη ετεροδομής, σιδηρομαγνήτη με χαμηλής ανισοτροπίας αντισιδηρομαγνήτη. Υπέθεσε πως η μαγνήτιση \vec{M}_i του i στρώματος, τόσο του σιδηρομαγνητικού όσο και του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, είναι ομοιόμορφη και παράλληλη στην διεπιφάνεια. Η συνθήκη ισορροπίας που προέκυψε είναι,

$$JS^2 \left[\sin \frac{1}{2} (\theta_{i+1} - \theta_i) + \sin \frac{1}{2} (\theta_{i-1} - \theta_i) \right] - 2K \sin \theta_i = 0 \quad (2.15)$$

όπου, $\frac{1}{2} \theta_i$ είναι η γωνία μεταξύ της μαγνήτισης \vec{M}_i και των αξόνων εύκολης μαγνήτισης. Κάνοντας την υπόθεση, πως η γωνία θ παίρνει συνεχείς τιμές, αντικατέστησε την εξίσωση ισορροπίας (2.15) με την διαφορική εξίσωση,

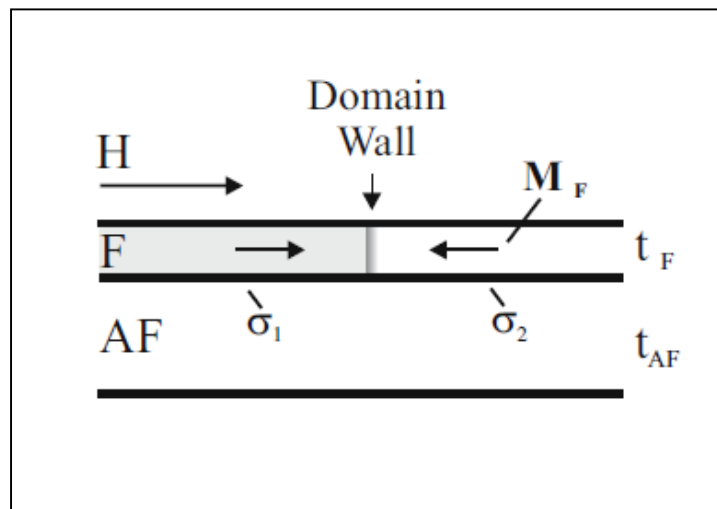
$$JS^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial i^2} - 4K \sin \theta = 0 \quad (2.16)$$

Επιλύοντας την εξίσωση αυτή ο Neel, υπολόγισε μικρότερη μετατόπιση του βρόχου υστέρησης. Επίσης, εκτίμησε ένα ελάχιστο πάχος, που απαιτείται να έχει το αντισιδηρομαγνητικό υλικό, προκειμένου να παρατηρηθεί μετατόπιση του βρόχου. Η υπόθεση του Neel (AF partial domain wall), έθεσε τη βάση για το σχηματισμό καινούριων και πιο επιτυχημένων θεωρητικών μοντέλων, για τη μελέτη του φαινομένου πόλωσης ανταλλαγής.

2.4 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΟΥ MALOZEMOFF

Ο Malozemoff, πρότεινε ένα καινούριο μηχανισμό σχηματισμού της ανισοτροπίας ανταλλαγής (μονοαξονικής ανισοτροπίας) [15, 17, 21, 22, 23]. Υπέθεσε, πως η επιφανειακή τραχύτητα στην διεπιφάνεια προκαλεί πλευρικές μεταβολές στο πεδίο πόλωσης ανταλλαγής, κάτι που οδηγεί στο σχηματισμό περιοχών (domains) στο στρώμα του αντισηδηρομαγνητικού υλικού.

Η διάταξη απεικονίζεται στο σχήμα 2.7. Το σιδηρομαγνητικό υλικό διαχωρίζεται σε δυο περιοχές με ένα τοίχωμα Bloch (domain wall). Η επιφανειακή ενέργεια στις δυο περιοχές δεν είναι ίδια.



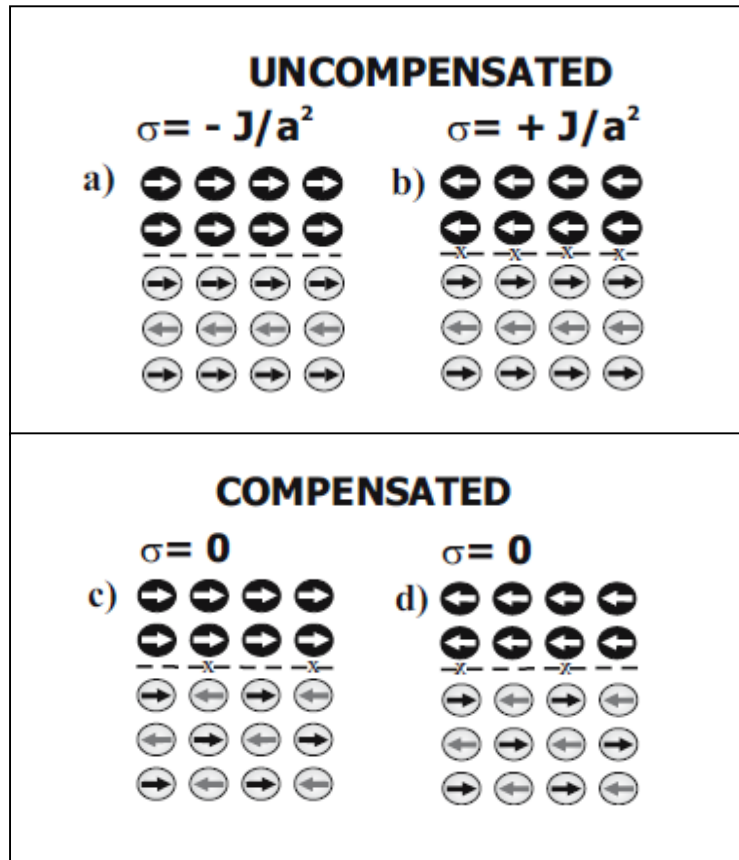
Σχήμα 2.7 Σχηματική απεικόνιση ετεροδομής F-AF όπου το υλικό διαχωρίζεται σε σιδηρομαγνητικές περιοχές διαφορετικής επιφανειακής ενέργειας [15].

Θεωρώντας την επιφανειακή ενέργεια στην μια περιοχή ίση με σ_1 και στην άλλη ίση με σ_2 , το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής προκύπτει,

$$H_{eb} = \frac{\Delta\sigma}{2M_F t_F} \quad (2.17)$$

όπου, M_F η μαγνήτιση και t_F το πάχος του σιδηρομαγνητικού υλικού.

Όταν το σύστημα είναι διατεταγμένο σύμφωνα με τις δομές δομή c) και d) του σχήματος 2.8 (ισοσταθμισμένη διάταξη, compensated structure), τότε πεδίο πόλωσης ανταλλαγής προκύπτει μηδενικό.



Σχήμα 2.8 Σχηματική απεικόνιση των ιδανικών διατάξεων των spins της διεπιφάνειας ετεροδομής F-AF [15].

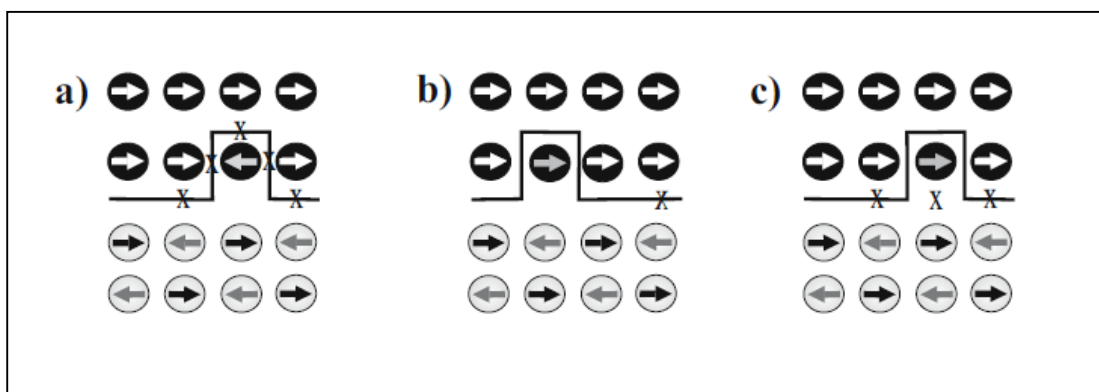
Αντίθετα, στην περίπτωση που το σύστημα ακολουθεί τις ιδανικές δομές a) και b) του σχήματος 2.8, η διαφορά της επιφανειακής ενέργειας των δυο περιοχών είναι,

$$\Delta\sigma = \frac{2J_i}{\alpha^2}. \quad (2.18)$$

Επομένως, αντικαθιστώντας στην σχέση (2.17), το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής προκύπτει,

$$H_{eb} = \frac{J_i}{\alpha^2 M_F t_F} \quad (2.19)$$

Το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής που υπολογίστηκε, προκύπτει αρκετές τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από τα πειραματικά αποτελέσματα. Οι ιδανικές διατάξεις, δηλαδή, του σχήματος 2.8, 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 απαιτούνται για την εμφάνιση μετατόπισης του βρόχου, σε μια ιδανικά ισοσταθμισμένη επιφάνεια. Η διάταξη απεικονίζεται στο σχήμα 2.9.



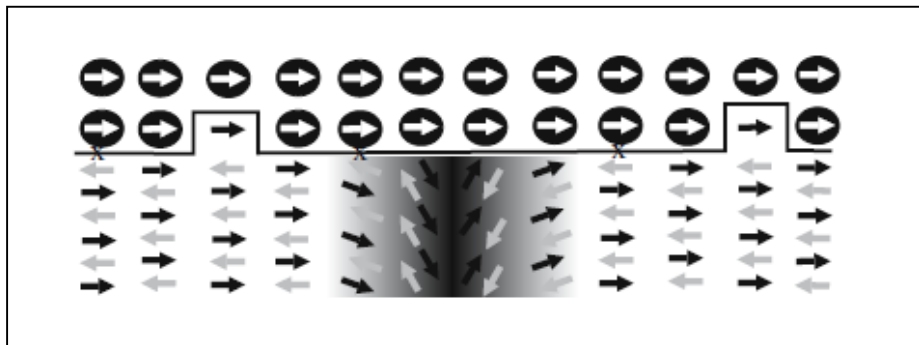
Σχήμα 2.9 Σχηματική απεικόνιση των διατάξεων των spins της διεπιφάνειας ετεροδομής F-AF, όπου λόγω επιφανειακής τραχύτητας ένα αντισιδηρομαγνητικό spin παρεισφρύνει στο μονοατομικό στρώμα του σιδηρομαγνητικού υλικού. Η διάταξη c) είναι η διάταξη ελάχιστης ενέργειας [15].

Η διάταξη που απεικονίζεται στην εικόνα c) του σχήματος 2.9, είναι εκείνη που ελαχιστοποιεί την ενέργεια του συστήματος. Κάθε ανωμαλία (λόγω τραχύτητας) στην διε-

πιφάνεια, συνεισφέρει στην ενεργειακή διαφορά μεταξύ των σιδηρομαγνητικών περιοχών κατά $2zJ$, με z τη διάσταση του συστήματος. Καθώς η δομή της διεπιφάνειας σε ατομικό επίπεδο είναι τυχαία, λόγω τραχύτητας, θα είναι τυχαία και η επιφανειακή ενέργεια της κάθε περιοχής, δηλαδή, $\sigma_l = \pm zJ / a^2$. Η μέση τιμή της ενέργειας σ σε μία επιφάνεια L^2 , είναι $\sigma = \sigma_l / \sqrt{N}$, με $N = L^2 / a^2$. Η επιφανειακή ενέργεια ανταλλαγής δίνεται από την σχέση,

$$J_{eb} = \frac{J_i}{L}. \quad (2.20)$$

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 στην διεπιφάνεια τοιχώματα Bloch, όπως απεικονίζεται στο σχήμα 2.10.



Σχήμα 2.10 Σχηματική απεικόνιση του σχηματισμού τοιχώματος Bloch, λόγω επιφανειακής τραχύτητας, σε ετεροδομή F-AF [15].

Η ενεργειακή διαφορά μεταξύ δυο περιοχών είναι,

$$\Delta\sigma = \frac{4zJ}{\pi\alpha L} \quad (2.21)$$

και το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής,

$$H_{eb} = \frac{2z\sqrt{A_{AF}K_{AF}}}{\pi^2 M_F t_F} \quad (2.22)$$

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

2.5 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΟΥ MAURI

Ο Mauri, βασιζόμενος στο μοντέλο των Meiklejohn και Bean, υπέθεσε πως το αντισιδηρομαγνητικό υλικό, δεν ανταποκρίνεται στο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο [15, 24]. Επίσης, υπέθεσε πως τα αντισιδηρομαγνητικά spins, σχηματίζουν ένα τοίχωμα Bloch παράλληλο στην διεπιφάνεια. Πιο συγκεκριμένα, οι υποθέσεις στις οποίες βασίστηκε το μοντέλο του είναι οι εξής,

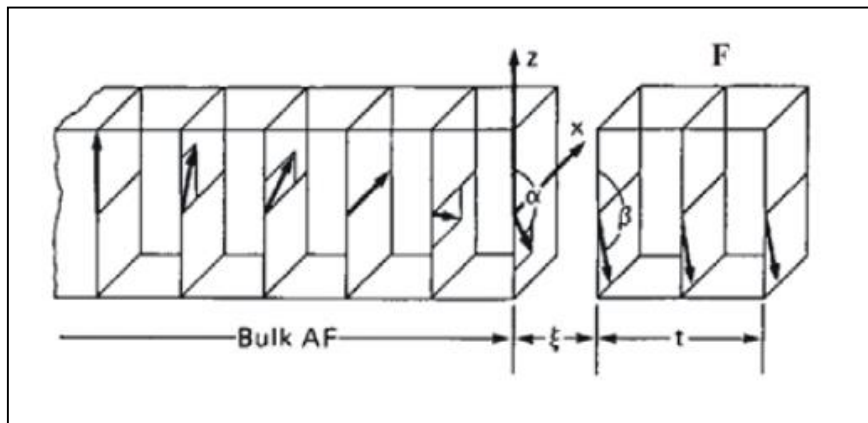
- Τόσο το σιδηρομαγνητικό, όσο και το αντισιδηρομαγνητικό στρώμα δεν σχηματίζουν περιοχές.
- Τα spins των δυο στρωμάτων, που σχηματίζουν την ετεροδομή, περιστρέφονται με σύμφωνο τρόπο (coherent rotation). Η περιστροφή τους αυτή, δηλαδή, περιγράφεται ικανοποιητικά από το μοντέλο των Stoner-Wohlfarth.
- Το αντισιδηρομαγνητικό στρώμα σχηματίζει τοίχωμα Bloch παράλληλο στην διεπιφάνεια.
- Η αντισιδηρομαγνητική επιφάνεια είναι μη ισοσταθμισμένη ή πλήρως ισοσταθμισμένη.
- Το εξωτερικό πεδίο (cooling field) είναι παράλληλο στον άξονα εύκολης μαγνήτισης του αντισιδηρομαγνητικού στρώματος.

Η διάταξη του συστήματος απεικονίζεται στο σχήμα 2.11. Παρατηρούμε πως, λόγω του εξωτερικού πεδίου, τα spins του σιδηρομαγνητικού στρώματος στρέφονται κατά γωνία β , 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 α , ενώ τα επόμενα ατομικά στρώματα στρέφονται σε μικρότερες γωνίες. Αυτός είναι ο μηχανισμός σχηματισμού του παράλληλου στην διεπιφάνεια τοιχώματος. Η ολική ενέργεια του συστήματος δίνεται από την σχέση,

$$\begin{aligned}
 E = & -\mu_0 H M_F t_F \cos(\theta - \beta) + \\
 & + K_F t_F \sin^2(\beta) - J_{eb} \cos(\beta - \alpha) - \\
 & - 2\sqrt{A_{AF} K_{AF}} (1 - \cos \alpha)
 \end{aligned}
 \tag{2.23}$$

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.



Σχήμα 2.11 Σχηματική απεικόνιση του σχηματισμού τοιχώματος Bloch παράλληλου στην διεπιφάνεια σε ετεροδομή F-AF, σύμφωνα με το μοντέλο του Mauri [15].

Ελαχιστοποιώντας την ενέργεια ως προς τις γωνίες α και β προκύπτουν οι εξισώσεις,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{H}{J_{eb}} \sin(\theta - \beta) + \sin(\beta - \alpha) = 0 \end{array} \right. \quad (2.24)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_0 M_F t_F}{J_{eb}} \frac{2\sqrt{A_{AF} K_{AF}}}{J_{eb}} \sin \alpha - \sin(\beta - \alpha) = 0 \end{array} \right. \quad (2.25)$$

Προσδιορίζουμε τις παραμέτρους,

$$P = \frac{2\sqrt{A_{AF} K_{AF}}}{J_{eb}} \quad (2.26)$$

και

$$H_{eb}^{\infty} \equiv - \frac{J_{eb}}{\mu_0 M_F t_F} \quad (2.27)$$

Λύνουμε το σύστημα των δυο εξισώσεων στην περίπτωση όπου $\theta=0$ και $K_F=0$. Αρχικά υπολογίζουμε από την δεύτερη εξίσωση την γωνία α ,

$$\alpha = \pm \arccos \left(\pm \frac{P - \cos \beta}{\sqrt{1 + P^2 - 2P \cos \beta}} \right) \quad (2.28)$$

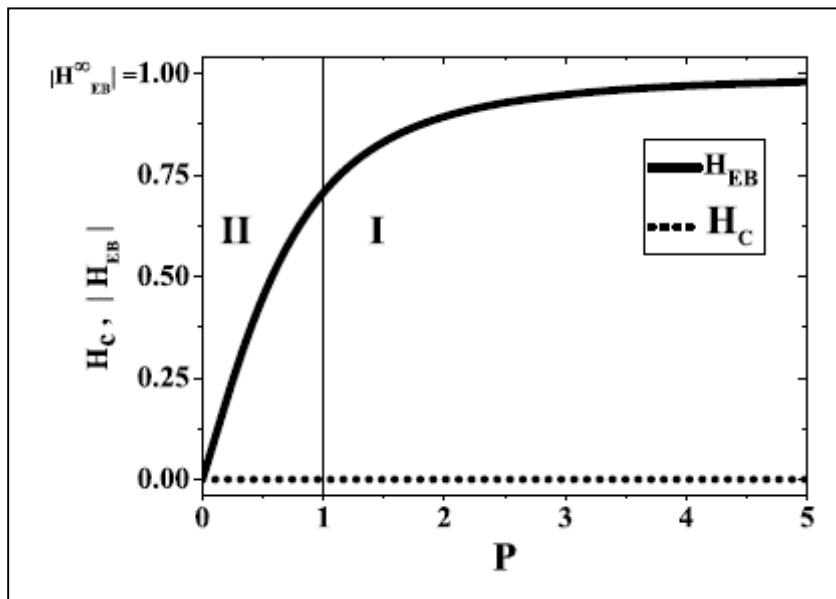
Εισάγουμε στην πρώτη εξίσωση το αποτέλεσμα (2.28) και χρησιμοποιώντας την συνθήκη ότι $\beta=-\pi/2$ όταν $H=H_c$ προκύπτουν τα πεδία H_{c1} και H_{c2} . Από τις σχέσεις (2.8) και

(2.9) υπολογίζουμε ότι, το συνεκτικό πεδίο είναι μηδενικό και ότι το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής δίνεται από την σχέση,

$$\begin{aligned}
 H_{eb} &= -\frac{J_{eb}}{\mu_0 M_F t_F} \frac{2\sqrt{A_{AF} K_{AF}}}{\sqrt{J_{eb}^2 + 4A_{AF} K_{AF}}} = \\
 &= -\frac{J_{eb}}{\mu_0 M_F t_F} \frac{P}{\sqrt{1 + P^2}}
 \end{aligned}
 \tag{2.29}$$

Το διάγραμμα του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής συναρτήσει της παραμέτρου P, απεικονίζεται στο σχήμα 2.12. Παρατηρούμε πως όταν $P \gg 1$, ισχύει ότι,

$$H_{eb} = H_{eb}^{\infty} = -\frac{J_{eb}}{\mu_0 M_F t_F}
 \tag{2.30}$$



Σχήμα 2.12 Το διάγραμμα του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής και του συνεκτικού πεδίου συναρτήσει της παραμέτρου P [15].

Επίσης, για μικρές τιμές τις παραμέτρου P , παρατηρούμε πως το πεδίο ελαττώνεται ενώ, όταν $P=0$ μηδενίζεται. Χρησιμοποιώντας το θεώρημα Taylor στην περίπτωση που $P \ll 1$ (weak coupling) προκύπτει,

$$H_{eb} = \frac{-2\sqrt{A_{AF}K_{AF}}}{\mu_0 M_F t_F} . \quad (2.31)$$

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

2.6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στο κεφάλαιο αυτό, παρουσιάστηκαν τα κυριότερα μακροσκοπικά και μεσοσκοπικά μοντέλα περιγραφής του φαινομένου πόλωσης ανταλλαγής. Μερικά ακόμα αναλυτικά μοντέλα είναι το μοντέλο του Nowak (domain state model, [25, 26]), το μοντέλο των Kim-Stamps [27] καθώς και το μοντέλο Spin Glass [28]. Μέσα από τις θεωρίες αυτές, προκύπτουν τα εξής βασικά συμπεράσματα,

- i. Για να παρατηρηθεί φαινόμενο πόλωσης και ανταλλαγής, απαιτείται, τα spins των δυο υλικών που σχηματίζουν την μαγνητική ετεροδομή να είναι μαγνητικά διατεταγμένα.
- ii. Η εξάρτηση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής από το αντίστροφο του πάχους του υλικού ($H_{eb} \sim 1/t_F$), υποδεικνύει τον επιφανειακό χαρακτήρα του φαινομένου πόλωσης και ανταλλαγής.
- iii. Η ανισοτροπία και το πάχος του αντισιδηρομαγνητικού υλικού, είναι καθοριστικής σημασίας χαρακτηριστικά κατά την μελέτη του φαινομένου πόλωσης και ανταλλαγής σε μαγνητικά συστήματα.
- iv. Το φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής προκύπτει εξαιτίας των μη ισοσταθμισμένων spins στην διεπιφάνεια της μαγνητικής ετεροδομής. Ενδιαφέρον παρουσιάζει

ζει η εξάρτηση του φαινομένου από την ενδοεπιφανειακή τραχύτητα, που μπορεί να ιδωθεί ως μηχανισμός σχηματισμού μη ισοσταθμισμένων spin στην ενδοεπιφάνεια.

- v. Ο σχηματισμός μαγνητικών περιοχών οδηγεί σε ρεαλιστικότερες τιμές για το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη του μηχανισμού στροφής της μαγνήτισης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

3 ΜΕΛΕΤΗ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ MONTE CARLO

3.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ MONTE CARLO

Η μέθοδος Monte Carlo (MC) στη Στατιστική Φυσική, είναι μια υπολογιστική μέθοδος προσομοίωσης [29, 30], ενός συστήματος με πολλούς βαθμούς ελευθερίας σε θερμοδυναμική ισορροπία. Η μέθοδος MC, όπως περιγράφεται στη συνέχεια και εφαρμόζεται σε αυτή την εργασία, προσομοιώνει ένα θερμοδυναμικό σύστημα στην κανονική συλλογή, δηλαδή σε σταθερή θερμοκρασία. Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo, επιλέγουμε ένα μικρό σχετικά αριθμό (μικρό) καταστάσεων του συστήματος, με κριτήριο το μέγιστο δυνατό στατιστικό βάρος τους στη διαμόρφωση των μέσων θερμικών τιμών των μακροσκοπικών ποσοτήτων (X) του συστήματος. Η μέθοδος επιλογής αναφέρεται ως **δειγματοληψία σπουδαιότητας** (importance sampling). Αυτές οι καταστάσεις εμφανίζονται στο άθροισμα των αναμενόμενων τιμών με μεγάλο στατιστικό βάρος, αφού το σύστημα παραμένει σε αυτές για αρκετά μεγάλο χρονικό διάστημα. Προσδιορίζοντας το στατιστικό βάρος της κάθε κατάστασης, η αναμενόμενη τιμή ενός φυσικού μεγέθους X μπορεί να υπολογιστεί, ως εξής,

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_{\mu} X_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \Rightarrow X_M = \frac{\sum_{i=1}^M p_{\mu_i}^{-1} X_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}} \quad (3.1)$$

Η επιλογή, όμως, του μικρού αριθμού καταστάσεων εισάγει σφάλμα στο τελικό αποτέλεσμα. Παρατηρούμε ότι, καθώς ο αριθμός των επιλεγμένων καταστάσεων M αυξάνει, τόσο η τιμή X_M τείνει προς την μέση τιμή ενώ, για $M \rightarrow \infty$ προκύπτει ότι $X_M \rightarrow \langle X \rangle$.

Στην συνέχεια, θα περιγράψουμε τις βασικές αρχές, που πρέπει να πληροί μια προσομοίωση Monte Carlo για την περιγραφή μιας κατάστασης θερμοδυναμικής ισορροπίας, θα μελετήσουμε τον αλγόριθμο του Metropolis και θα εφαρμόσουμε την μέθοδο για την μελέτη του συστήματος Heisenberg στο απλό κυβικό πλέγμα.

3.2 ΒΑΣΙΚΕΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ ΚΑΙ ΑΡΧΕΣ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ MONTE CARLO

Μία από τις βασικές διαδικασίες της μεθόδου Monte Carlo είναι η δειγματοληψία καταστάσεων, που εμφανίζονται στο άθροισμα των αναμενόμενων τιμών των φυσικών μεγεθών, με μεγάλο στατιστικό βάρος (importance sampling)[29]. Ένα σύστημα που περιγράφεται από την Κανονική Συλλογή ακολουθεί, στην κατάσταση ισορροπίας, την κατανομή Boltzmann [31]. Επομένως, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την κατανομή αυτή, για να υπολογίσουμε το στατιστικό βάρος της κάθε κατάστασης. Η πιθανότητα το σύστημα να βρεθεί στην κατάσταση μ , λοιπόν, δίνεται από την σχέση,

$$p_{\mu} = \frac{e^{-\beta E_{\mu}}}{Z} . \quad (3.2)$$

Αντικαθιστώντας στην σχέση 3.1, προκύπτει πως η εκτίμηση της μέσης τιμής γίνεται, τώρα, από την σχέση,

$$X_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M X_{\mu_i} . \quad (3.3)$$

Παρατηρούμε από την τελευταία σχέση, πως ο παράγοντας Boltzmann δεν εμφανίζεται. Μέσω αυτής της διαδικασίας, 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. Απομένει, να βρούμε έναν τρόπο επιλογής των M καταστάσεων. Για να το πετύχουμε αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε τις στοχαστικές διαδικασίες Markov [29].

Μέσω των διαδικασιών Markov, μπορούμε να κατασκευάσουμε μια κατάσταση ν από μια αρχική κατάσταση μ . Ο τρόπος με τον οποίο κατασκευάζεται η νέα κατάσταση, είναι τυχαίος. Η πιθανότητα $P(\mu \rightarrow \nu)$, ονομάζεται πιθανότητα μετάβασης από την αρχική κατάσταση μ σε μια τελική κατάσταση ν . Κατά τον σχηματισμό των καινούριων καταστάσεων, οι πιθανότητες μετάβασης πρέπει να παραμένουν χρονικά σταθερές και να εξαρτώνται, μόνο, από τις δυο καταστάσεις μεταξύ των οποίων γίνεται κάθε φορά η μετάβαση. Επίσης, πρέπει να τηρείται και η συνθήκη κανονικοποίησης,

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (3.4)$$

ενώ, η πιθανότητα $P(\mu \rightarrow \mu)$ δεν είναι απαραίτητα μηδενική. Επαναλαμβάνοντας την διαδικασία Markov πολλές φορές, κατασκευάζουμε μια αλληλουχία καταστάσεων που ονομάζεται αλυσίδα Markov. Για να ακολουθούν, όμως, οι καταστάσεις του συστήματος την κατανομή Boltzmann, είναι απαραίτητο, ο αλγόριθμος που χρησιμοποιούμε να είναι συμβατός με τις συνθήκες της εργοδικότητας και της λεπτομερούς ισορροπίας, που εξηγούνται στη συνέχεια.

Σε μια κατανομή Boltzmann όλες οι πιθανότητες μετάβασης είναι μη μηδενικές. Σύμφωνα, λοιπόν, με την εργοδικότητα, το σύστημα μπορεί να βρεθεί από μια αρχική κατάσταση σε οποιαδήποτε άλλη κατάσταση. Τέλος, μπορούμε να επιβάλλουμε την κατανομή Boltzmann, ως την κατανομή που ακολουθεί το σύστημα, όταν βρίσκεται σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω της συνθήκης λεπτομερούς ισορροπίας, σύμφωνα με την οποία,

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu) . \quad (3.5)$$

Η συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας [29], ουσιαστικά, ισοδυναμεί με την συνθήκη θερμοδυναμικής ισορροπίας. Ο ρυθμός μετάβασης, δηλαδή, από μια αρχική κατάσταση μ σε μια κατάσταση ν , είναι ο ίδιος με τον ρυθμό μετάβασης από την κατάσταση ν στην μ . Ικανοποιώντας τη συνθήκη λεπτομερούς ισορροπίας προκύπτει ότι,

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (3.6)$$

Ένας αλγόριθμος Monte Carlo, που ικανοποιεί τη συνθήκη που περιγράφει η παραπάνω εξίσωση (3.6), προσομοιώνει ένα φυσικό σύστημα σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας.

3.3 Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΤΟΥ METROPOLIS

Η αριθμητική προσομοίωση Monte Carlo, με τον αλγόριθμο του Metropolis [29, 30, 32], ακολουθεί τους βασικούς κανόνες, που αναφέρθηκαν στην προηγούμενη παράγραφο.

Η σχέση (3.6), αφήνει πολλά περιθώρια στην επιλογή της μορφής της πιθανότητας $P(\mu \rightarrow \nu)$, όπως για παράδειγμα $P(\mu \rightarrow \nu) \sim e^{-\beta(E_\mu - E_\nu)/2}$. Όμως, όλες οι επιλογές δε συγκλίνουν το ίδιο γρήγορα προς τη θερμοδυναμική ισορροπία. Για να το καταλάβουμε αυτό, μπορούμε να γράψουμε την πιθανότητα μετάβασης $P(\mu \rightarrow \nu)$, σαν γινόμενο μιας **πιθανότητας επιλογής** $g(\mu \rightarrow \nu)$ της κατάστασης ν , με δεδομένη την αρχική κατάσταση μ , επί μια **πιθανότητα αποδοχής** $A(\mu \rightarrow \nu)$ της τελικής κατάστασης ν , δεδομένου ότι, αρχικά το σύστημα βρίσκεται στην κατάσταση μ ,

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu),$$

Έτσι, έχουμε τη δυνατότητα να μεταβάλλουμε τον αλγόριθμο, επιλέγοντας μια τυχαία διαδικασία δημιουργίας μιας νέας κατάστασης μ από μια κατάσταση ν , με πιθανότητα $g(\mu \rightarrow \nu)$ και στη συνέχεια αποδεχόμαστε ή απορρίπτουμε την κατάσταση ν με πιθανότητα $A(\mu \rightarrow \nu)$. Ο μόνος περιορισμός είναι, να ικανοποιείται η λεπτομερής ισορροπία ήτοι $g(\mu \rightarrow \nu) / g(\nu \rightarrow \mu) = A(\nu \rightarrow \mu) / A(\mu \rightarrow \nu)$.

Βέβαια, η επιλογή που θα κάνουμε επηρεάζει και τη σύγκλιση του αλγορίθμου. Σε ένα επιτυχή αλγόριθμο, η επιλογή των καταστάσεων πρέπει να γίνεται με 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, περιορίζουμε τους υπολογισμούς εντός του μικρού αριθμού καταστάσεων του φάσματος αυτού και δεν συμπεριλαμβάνουμε μεταβάσεις σε καταστάσεις που διαφέρουν ενεργειακά, κατά πολύ, από την αρχική μας κατάσταση. Αυτό επιτυγχάνεται, μεταβάλλοντας κάθε φορά ένα μόνο spin του συστήματος (single-spin update).

Ο αλγόριθμος Metropolis συνίσταται στην τυχαία επιλογή της νέας κατάστασης, όπου ένα spin ανανεώνεται (αλλάζει κατεύθυνση) οπότε $g(\mu \rightarrow \nu) = 1/N$, όπου N ο αριθμός των spins του συστήματος. Στη συνέχεια η πιθανότητα αποδοχής ορίζεται ως

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, & E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1, & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (3.7)$$

Η παραπάνω σχέση συνοψίζει ουσιαστικά τον αλγόριθμό του Metropolis. Άλλες επιλογές για την ποσότητα $A(\mu \rightarrow \nu)$, 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 τον αλγόριθμο Metropolis Monte-Carlo για το μοντέλο Heisenberg σε πλέγμα με N spin,

1. Επιλογή αρχικού σχηματισμού των N spin
2. Τυχαία επιλογή ενός spin s_i και μεταβολή του ($s_i' \rightarrow s_i + \Delta s_i$)
3. Υπολογισμός της μεταβολής της ολικής ενέργειας ΔE
4. Αν $\Delta E < 0$, αποδοχή της νέας κατάστασης
5. Αν $\Delta E > 0$:
 - 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 Monte Carlo step per spin (MCSS))
7. Υπολογισμός μακροσκοπικών ποσοτήτων πχ E , M κλπ.
8. Επανάληψη των βημάτων 2-6, M φορές
9. Υπολογισμός των μέσων τιμών $\langle A \rangle$, $\langle A^2 \rangle$ και του στατιστικού σφάλματος

$$\Delta A = \pm \sqrt{(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) / (M - 1)}$$

Μερικές παρατηρήσεις για τη σωστή εφαρμογή του παραπάνω αλγόριθμου MMC:

- 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 προσδιορίσουμε τον χρόνο εφησυχασμού από το διάγραμμα της χρονικής εξέλιξης ενός θερμοδυναμικού μεγέθους, έτσι ώστε να μην συμπεριλάβουμε τις αρχικές καταστάσεις (M_0) στους υπολογισμούς των μέσων τιμών στην ισορροπία.

- 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 (τ) MCSS παρεμβάλλονται μεταξύ των βημάτων 6 και 7 του αλγόριθμου. Τυπική τιμή είναι $\tau \sim 10$ MCSS.

3.4 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ ΜΟΝΤΕ CARLO ΓΙΑ ΤΗΝ ΜΕΛΕΤΗ ΣΙΔΗΡΟ-ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΑΝΤΙΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Ακολουθώντας τα βήματα της μεθόδου Metropolis-Monte Carlo, θα μελετήσουμε το μοντέλο του Heisenberg για συμβατικό (bulk) σιδηρομαγνητικό (ή αντισιδηρομαγνητικό) υλικό. Η ολική ενέργεια ενός συστήματος ανισοτροπίας K προσανατολισμένης στον άξονα z και ενέργειας ανταλλαγής πρώτων γειτόνων J , υπό την επίδραση εξωτερικού πεδίου H στο άξονα- z , δίνεται από την σχέση,

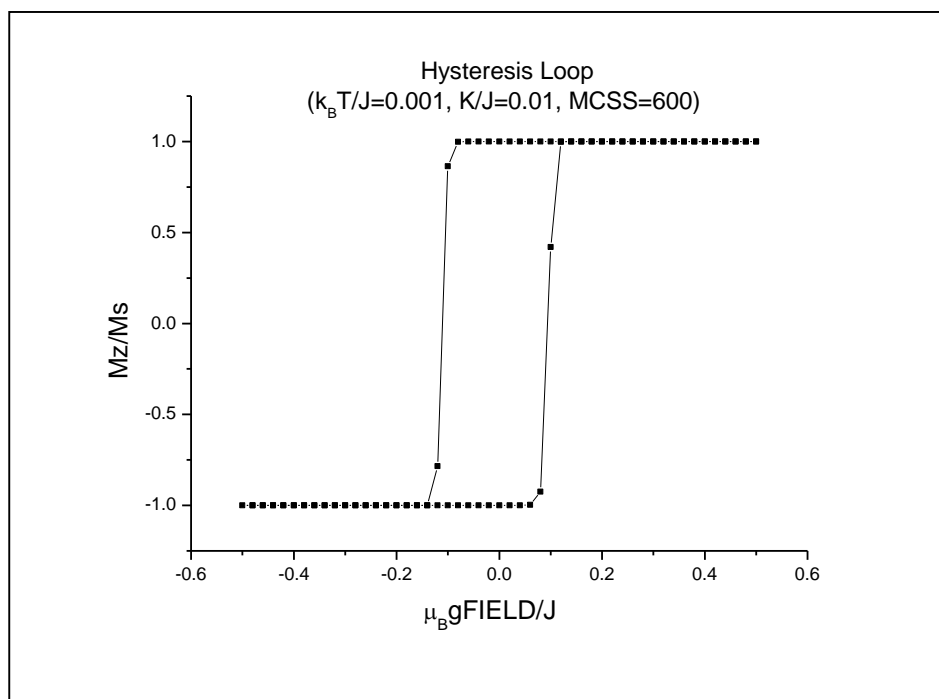
$$\begin{aligned}
 E &= E_{xc} + E_{anisotropy} + E_{Zeemann} = \\
 &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - K \sum_i s_{iz}^2 - \vec{H} \sum_i \vec{s}_i
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Για να διευκολυνθούν οι υπολογισμοί αλλά και η γραφική απεικόνιση των αποτελεσμάτων, διαστατοποιούμε την ενέργεια ως εξής,

$$\frac{E}{J} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \frac{K}{J} \sum_i s_{iz}^2 - \frac{\vec{H}}{J} \sum_i \vec{s}_i \tag{3.9}$$

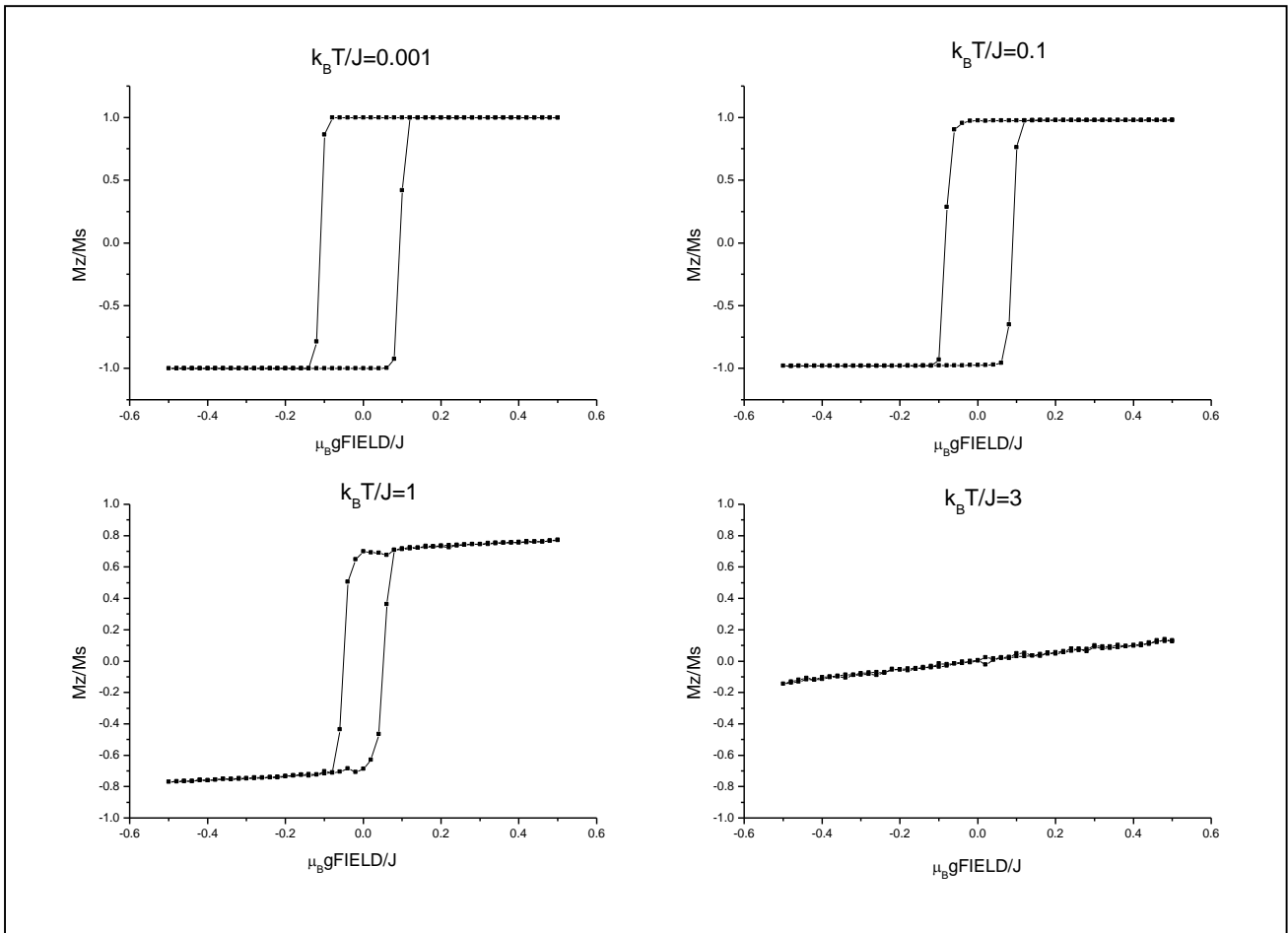
A. Σιδηρομαγνητικό σύστημα:

Ο βρόχος υστέρησης απεικονίζεται στο σχήμα 3.1.



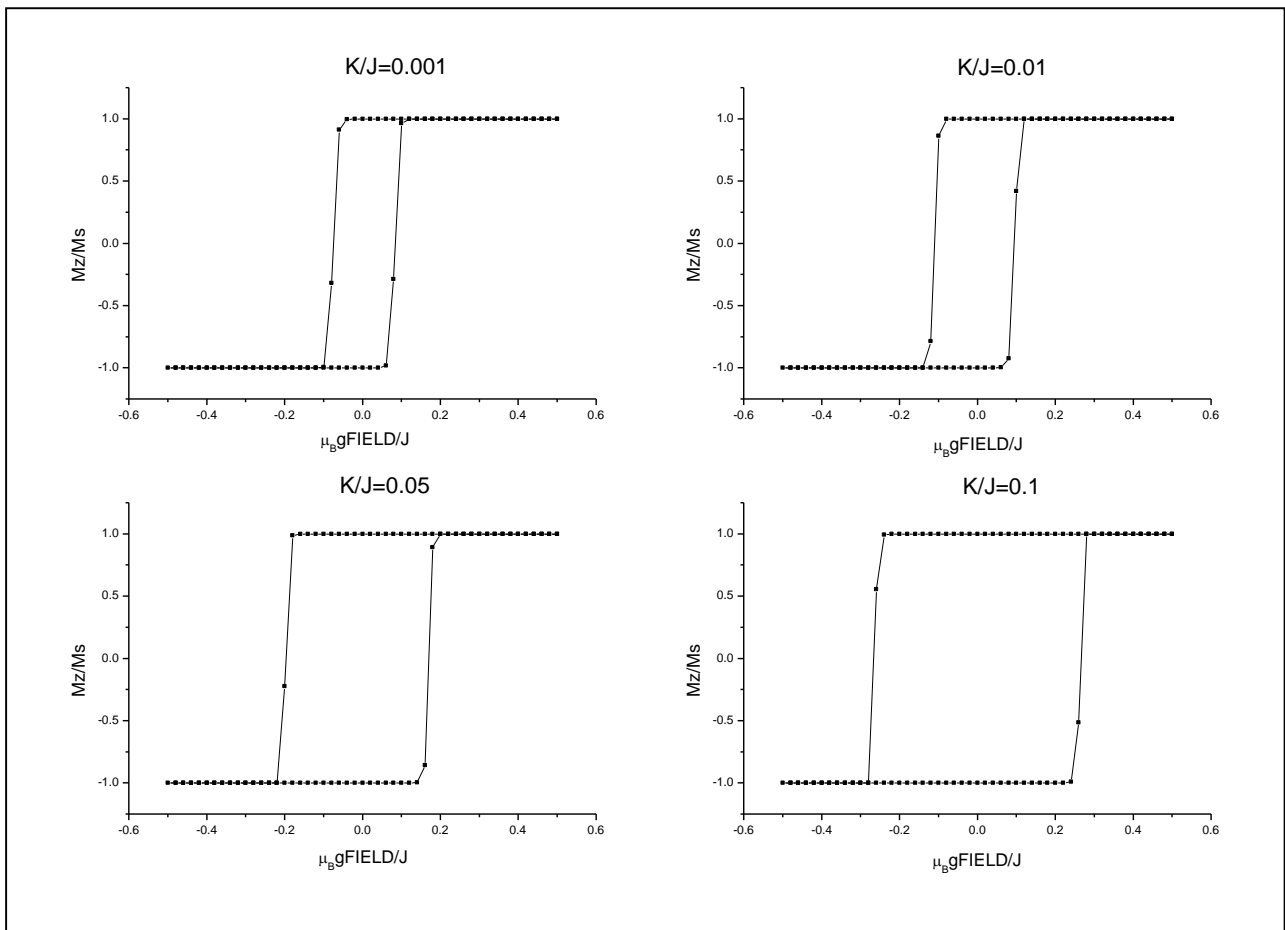
Σχήμα 3.1 Βρόχος υστέρησης σιδηρομαγνητικού υλικού

Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε τις μεταβολές στο βρόχο υστέρησης, καθώς μεταβάλλεται η θερμοκρασία του συστήματος. Παρατηρούμε ότι, αυξανόμενης της θερμοκρασίας, το συνεκτικό πεδίο (πλάτος του βρόχου) και η παραμένουσα μαγνήτιση ($M_z[0]$) του συστήματος, ελαττώνονται (σχήμα 3.2). Η ελάττωση αυτή, οφείλεται στην αύξηση των θερμικών διακυμάνσεων, που οδηγεί στην καταστροφή της μαγνητικής τάξης. Επίσης, σε υψηλές θερμοκρασίες ($T=3J/k_B$), η εξάρτηση της μαγνήτισης συναρτήσει του πεδίου είναι γραμμική, δηλαδή το σύστημα έχει μεταβεί στην παραμαγνητική κατάσταση.



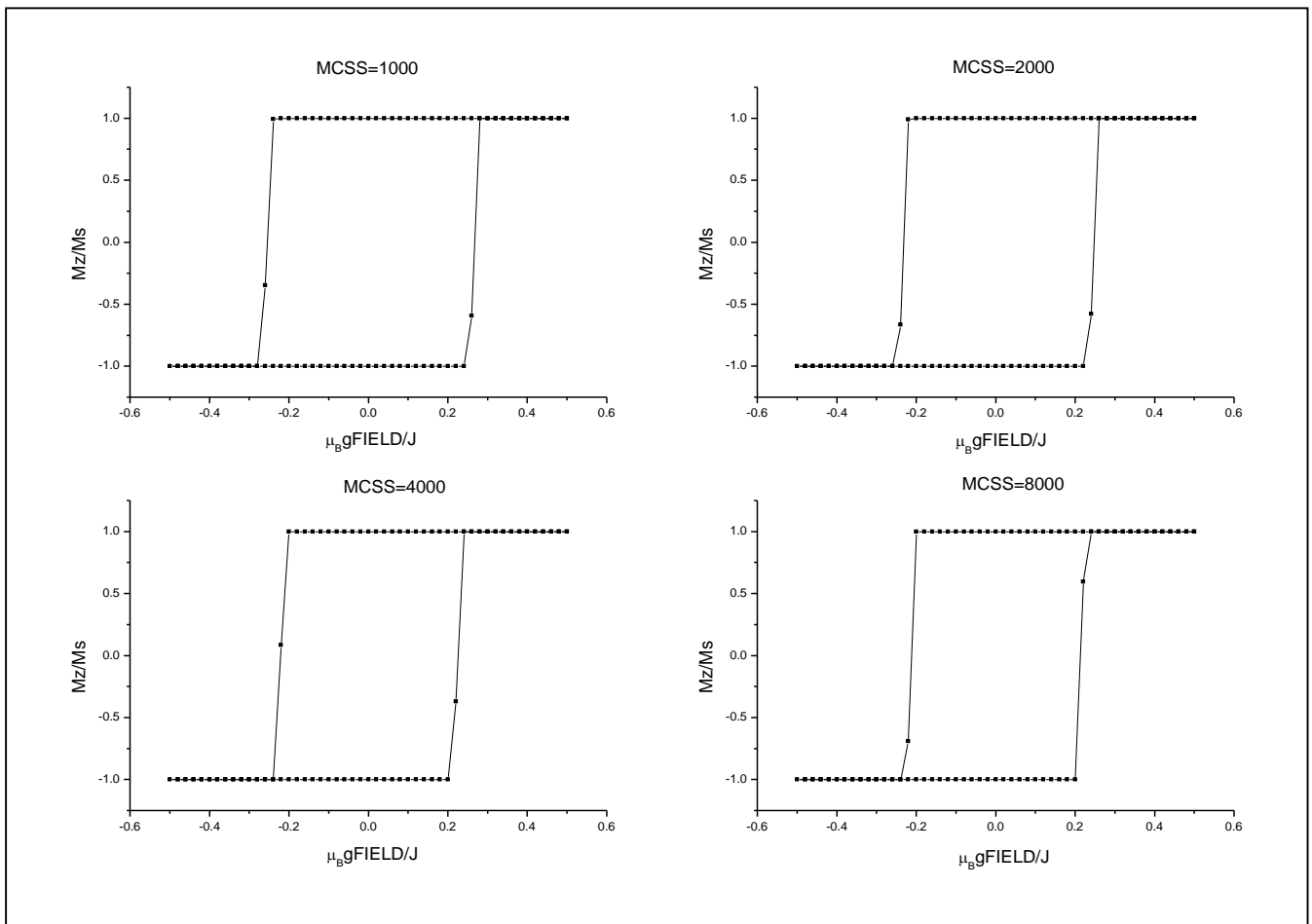
Σχήμα 3.3 Βρόχοι υστέρησης σιδηρομαγνητικού υλικού για διαφορετικές θερμοκρασίες.

Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε την εξάρτηση των φαινομένων υστέρησης από την ανισοτροπία του συστήματος. Παρατηρούμε, από το σχήμα 3.4, πως η αύξηση της ανισοτροπίας του συστήματος, οδηγεί σε αύξηση του συνεκτικού πεδίου (πλάτος του βρόχου). Η αύξηση αυτή είναι δικαιολογημένη καθώς, όσο πιο ανιστροπικό είναι το σύστημα, τόσο μεγαλύτερη ενέργεια απαιτείται για να στρέψουμε τα spins από τους άξονες ισορροπίας τους (easy axis) και να το απομαγνητίσουμε (ή να αλλάξουμε το πρόσημο της μαγνήτισης).



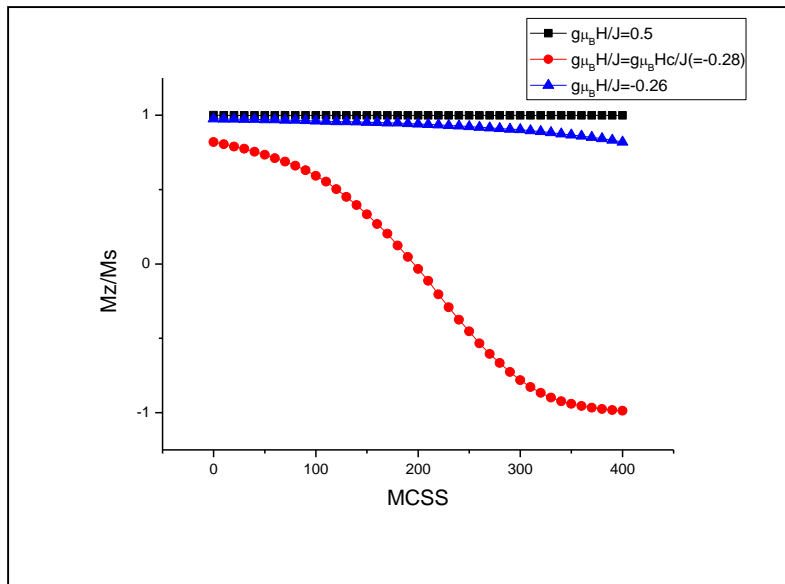
Σχήμα 3.4 Βρόχοι υστέρησης σιδηρομαγνητικού υλικού για διαφορετικές τιμές ανισοτροπίας.

Σε αυτό το σημείο πρέπει να τονίσουμε, πως οι καταστάσεις από τις οποίες διέρχεται το σύστημα, καθώς μεταβάλλεται το εξωτερικό πεδίο, είναι καταστάσεις μετασταθούς ισορροπίας. Επομένως, μεταβάλλοντας τον αριθμό των MCSS αναμένουμε διαφορετικούς βρόχους υστέρησης. Στο σχήμα 3.5, παρατηρούμε το ίδιο σύστημα σε διαφορετικές χρονικές στιγμές (διαφορετικό αριθμό MCSS). Φυσικά, ο αριθμός των MCSS δεν αντιστοιχεί στον φυσικό χρόνο. Η μέθοδος αυτή, δηλαδή, δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό του χρόνου στον οποίο ένα μαγνητισμένο υλικό θα απομαγνητιστεί, αν σταματήσουμε να το διεγείρουμε εξωτερικά.



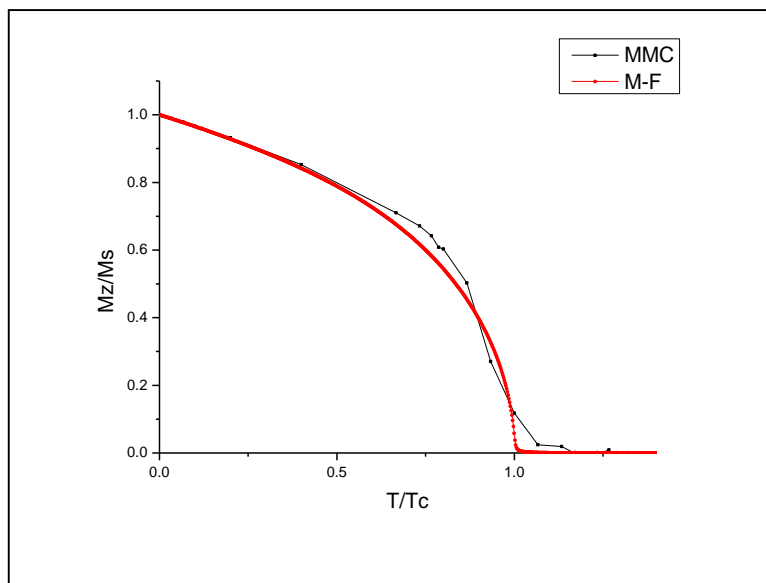
Σχήμα 3.5 Βρόχοι υστέρησης σιδηρομαγνητικού υλικού για διαφορετικές τιμές MCSS.

Στο διάγραμμα του σχήματος 3.6, απεικονίζεται η μεταβολή της μαγνήτισης συναρτήσει των MCSS (χρόνου). Παρατηρούμε πως για διαφορετικές τιμές του πεδίου, ο χρόνος εφησυχασμού είναι διαφορετικός. Η μαγνήτιση του συστήματος μεταβάλλεται απότομα, όταν το εξωτερικό πεδίο είναι ίσο με το συνεκτικό πεδίο, κάτι που βρίσκεται σε συμφωνία, με την μεταβολή που παρατηρείται στο πλάτος του βρόχου υστέρησης συναρτήσει του χρόνου (σχήμα 3.5).



Σχήμα 3.6 Διάγραμμα μαγνήτισης συναρτήσει των MCSS για διαφορετικές τιμές του εξωτερικού πεδίου.

Τέλος, στο σχήμα 3.7 απεικονίζεται το διάγραμμα της αλλαγής φάσης δεύτερης τάξης (παραμένουσα μαγνήτιση συναρτήσει της θερμοκρασίας), όπως υπολογίζεται με τις μεθόδους MMC και Mean Field [4,5,31]. Παρατηρούμε πως η μέθοδος MMC, δεν προσεγγίζει σωστά το κρίσιμο σημείο. Αυτό συμβαίνει καθώς, στη μέθοδο αυτή χρησιμοποιούμε ένα μικρό δείγμα του κρυστάλλου (10 x 10 x 10), ενώ το μήκος συσχέτισης στο κρίσιμο σημείο απειρίζεται. Επομένως, το δείγμα δεν είναι επαρκώς μεγάλο για να συμπεριλάβουμε την φυσική συμπεριφορά των θερμικών διακυμάνσεων.



Σχήμα 3.7 Διάγραμμα της παραμένουσας μαγνήτισης συναρτήσει της θερμοκρασίας [33, 34].

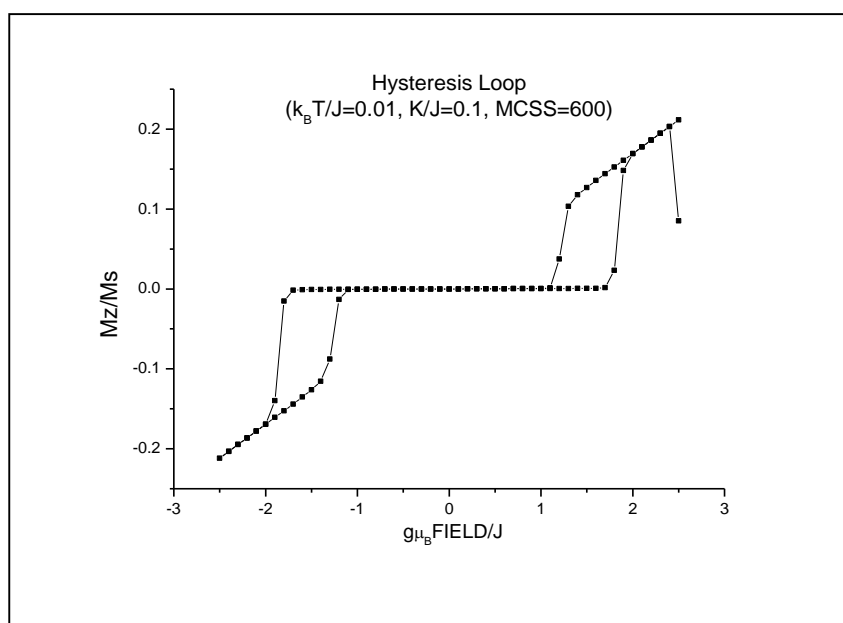
B. Αντισιδηρομαγνητικό σύστημα

Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε τα αντισιδηρομαγνητικά υλικά με τη μέθοδο Metropolis-Monte Carlo. Η μαγνητική διάταξη περιγράφεται σύμφωνα με το πρότυπο του Heisenberg. Η ενέργεια του συστήματος, ανισοτροπίας K_{AF} προσανατολισμένη στον άξονα z και ενέργειας ανταλλαγής μεταξύ πρώτων γειτόνων J, δίνεται από την σχέση,

$$\frac{E}{J} = \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \vec{s}_j - \frac{K_{AF}}{J} \sum_i s_{iz}^2 - \frac{\vec{H}}{J} \sum_i \vec{s}_i \quad (3.10)$$

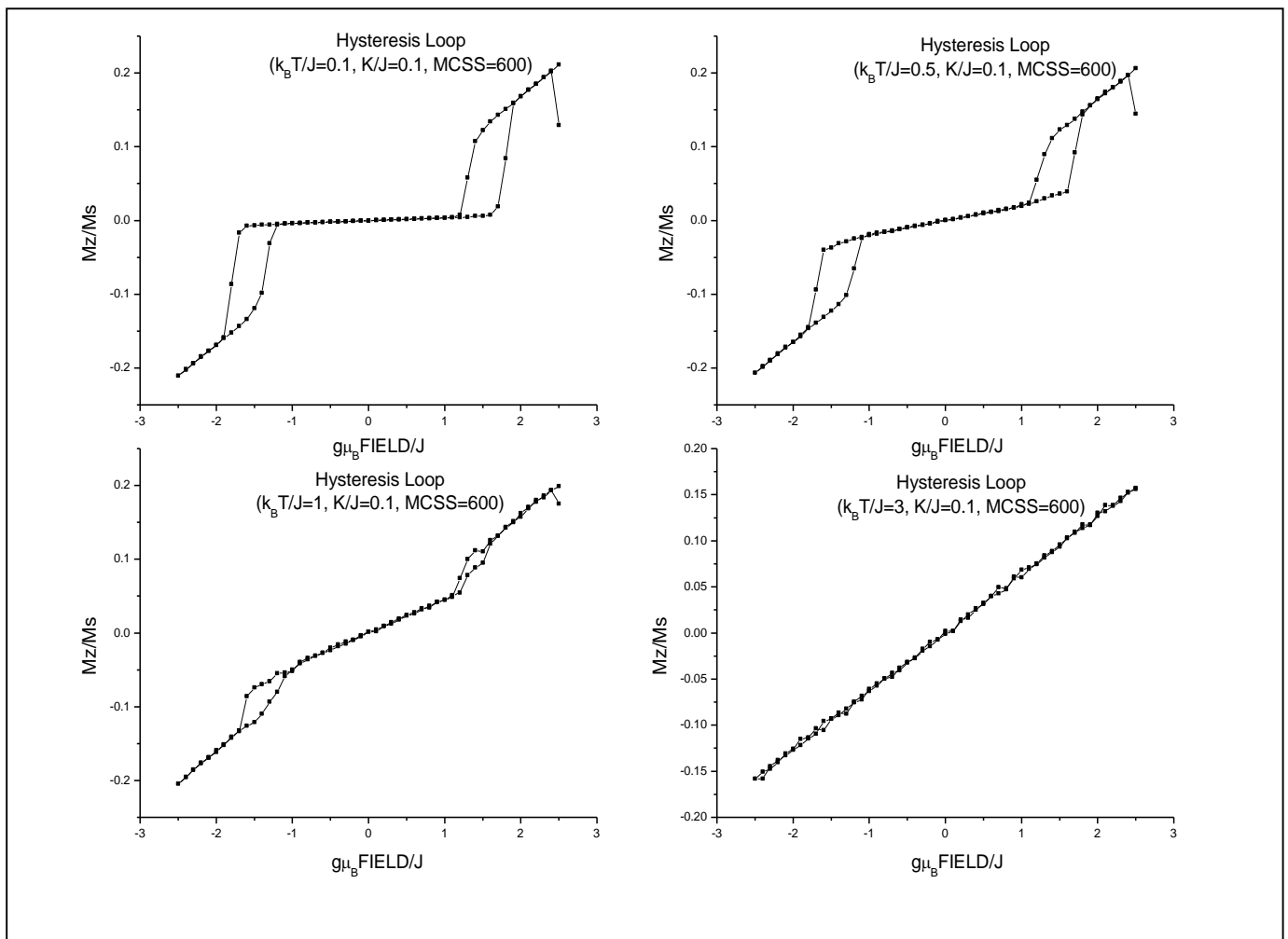
όπου, $J > 0$.

Στο σχήμα 3.8, απεικονίζεται το διάγραμμα της μαγνήτισης συναρτήσει του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου για αντισιδηρομαγνητικό υλικό.



Σχήμα 3.8 Διάγραμμα της μαγνήτισης συναρτήσει του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

Παρατηρούμε, πως στο σύστημα δεν εμφανίζεται παραμένουσα μαγνήτιση. Τα φαινόμενα υστέρησης προκύπτουν λόγω της ανισοτροπίας, που συντελεί στον μηδενισμό της μαγνήτισης για χαμηλά εξωτερικά πεδία. Αυξανομένης της ανισοτροπίας, δηλαδή, το σύστημα ανταποκρίνεται όλο και δυσκολότερα στο εξωτερικό πεδίο. Για μηδενική ανισοτροπία, η απόκριση του συστήματος στο εξωτερικό πεδίο είναι γραμμική. Τέλος, αυξανομένης της θερμοκρασίας, τα φαινόμενα υστέρησης είναι ασθενέστερα, ενώ για θερμοκρασίες μεγαλύτερες της κρίσιμης ($T > T_N$), το σύστημα συμπεριφέρεται ως παραμαγνητικό (σχήμα 3.9).



Σχήμα 3.9 Διαγράμματα μαγνήτισης συναρτήσει του εξωτερικού πεδίου αντισηδηρομαγνητικού συστήματος, σε διαφορετικές θερμοκρασίες.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

4 ΜΕΛΕΤΗ ΤΩΝ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΥΣΤΕΡΗΣΗΣ ΚΑΙ ΤΟΥ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟΥ ΠΟΛΩΣΗΣ-ΑΝΤΑΛΛΑΓΗΣ ΣΕ ΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑΤΑ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΥ MMC

Στην κεφάλαιο αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο Metropolis Monte Carlo για την μελέτη των φαινομένων υστέρησης και του φαινομένου πόλωσης ανταλλαγής, σε διμαγνητικά νανοσύρματα με μορφολογία σιδηρομαγνητικού πυρήνα – αντισιδηρομαγνητικού φλοιού (core-shell nanowires).

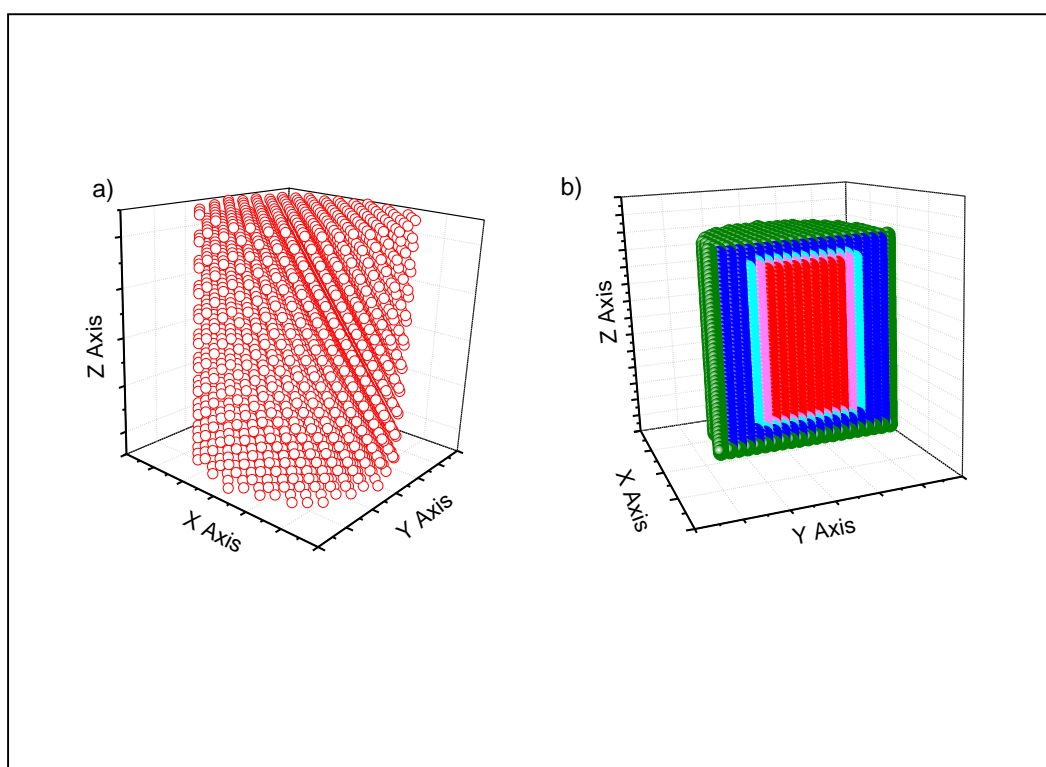
4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΑ ΜΑΓΝΗΤΙΚΑ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑΤΑ (ΜΝΣ)

Τα μαγνητικά νανοσύρματα, παρουσιάζουν ιδιαίτερο φυσικό και τεχνολογικό ενδιαφέρον. Εξαιτίας του ανισοτροπικού σχήματός τους, οι δομές αυτές παρουσιάζουν υψηλά συνεκτικά πεδία. Ο έλεγχος του σχήματος των δομών αυτών δίνει τη δυνατότητα ελέγχου των μαγνητικών ιδιοτήτων τους, γεγονός που τα καθιστά κατάλληλα υλικά για την κατασκευή σύγχρονων τεχνολογικών εφαρμογών, όπως σύγχρονα μέσα μαγνητικής αποθήκευσης, σύγχρονες μεθόδους κατάλυσης, νανοηλεκτρονικές διατάξεις καθώς και σύγχρονες βιολογικές και ιατρικές εφαρμογές [35, 36, 37].

Πιο συγκεκριμένα, εστιάζοντας σε κυλινδρικά ΜΝΣ που θα μας απασχολήσουν εδώ, η διάμετρος της βάσης του κυλίνδρου (x - y διευθύνσεις) είναι αρκετές τάξεις μεγέθους μικρότερη από το εύρος του τοιχώματος Bloch, με αποτέλεσμα, το σύστημα σε αυτές τις διευθύνσεις να μην σχηματίζει μαγνητικές περιοχές (single domain state). 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 (domains) κατά μήκος του άξονα του κυλίνδρου (z -άξονας). Δεν μπορούμε, δηλαδή, να υποθέσουμε σύμφωνη στροφή των spins, κατά την ανταπόκριση του συστήματος σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Το γεγονός αυτό, μας οδηγεί να προχωρήσουμε πέρα από την απλουστευμένη περιγραφή της μαγνητικής κατάστασης του ΝΣ με μία μονοαξονική μαγνητική ροπή (μοντέλο Ising) και να πραγματοποιήσουμε 3-Δ μοντελοποίηση σε ατομιστική κλίμακα.

Ενδιαφέρον εμφανίζουν τα διμαγνητικά νανοσύρματα (ΔΜΝΣ), με μορφολογία σιδηρομαγνητικού πυρήνα - αντισιδηρομαγνητικού φλοιού, που σχηματίζονται συνήθως από κάποιο σιδηρομαγνητικό υλικό και το οξείδιό του. Η διαδικασία οξείδωσης της εξωτερικής επιφάνειας ενός ΜΝΣ προκύπτει, συνήθως, είτε ανεξέλεγκτα κατά τη διαδικασία ανάπτυξης λόγω έκθεσης στο ατμοσφαιρικό οξυγόνο, είτε ελεγχόμενα σε περιβάλλον οξυγόνου. Και στις δυο περιπτώσεις έχουν παρατηρηθεί πειραματικά [35, 36, 37], μια σειρά από χαρακτηριστικές συμπεριφορές (οριζόντια μετατόπιση βρόχου υστέρησης, φαινόμενο παίδευσης (training effect), κλπ.), που συνιστούν εκδηλώσεις του φαινομένου πόλωσης-ανταλλαγής, όπως αυτό είναι γνωστό και μελετημένο σε λεπτά υμένια [15, 17] και νανοσωματίδια [6, 16, 38]

Στην εργασία αυτή, μελετάται η εξάρτηση του συνεκτικού πεδίου H_c και του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής H_{eb} , από το ύψος του νανοσύρματος. Οι αριθμητικοί υπολογισμοί πραγματοποιούνται σε συστήματα σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων (σχήμα 4.1a) καθώς και σε διμαγνητικά νανοσύρματα (σχήμα 4.1b).



Σχήμα 4.1 Μαγνητικά νανοσύρματα:

- a) Σιδηρομαγνητικό νανοσύρμα
- b) Διμαγνητικό νανοσύρμα

Επίσης, αριθμητικοί υπολογισμοί πραγματοποιούνται στα συστήματα αυτά, απουσία διπολικών αλληλεπιδράσεων αλλά και παρουσία αυτών [39]. Από την σύγκριση των αποτελεσμάτων, αναδεικνύεται η επίδραση των διπολικών αλληλεπιδράσεων στα φαινόμενα υστέρησης και στο φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής του συστήματος των νανοσυρμάτων. Ακόμα, μελετάται ο μηχανισμός στροφής της μαγνήτισης και ο σχηματισμός τοιχωμάτων Bloch εντός των νανοσυρμάτων. Τέλος, μελετάται η εξάρτηση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής των διμαγνητικών νανοσυρμάτων από το ύψος, σε συστήματα που εμφανίζουν ενδοεπιφανειακή τραχύτητα (interface roughness). Από την σύγκριση των αποτελεσμάτων με εκείνα του ιδανικού συστήματος, αναδεικνύεται ο ρόλος της τραχύτητας στο φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής.

4.2 ΜΕΘΟΔΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ

Στην παράγραφο αυτή, αναφέρονται ορισμένα σημαντικά βήματα του αλγόριθμου της μελέτης των φαινομένων υστέρησης και του φαινομένου πόλωσης ανταλλαγής στα μαγνητικά νανοςύρματα.

Κατασκευή της δομής: Αρχικά, κατασκευάζουμε ένα απλό κυβικό πλέγμα τριών διαστάσεων [39]. Ορίζουμε, δηλαδή, τα θεμελιώδη διανύσματα $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ του πλέγματος και στη συνέχεια μέσω της σχέσης (4.1), προκύπτουν τα σημεία του απλού κυβικού πλέγματος.

$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (4.1)$$

Στη συνέχεια, αποκόπτουμε περιοχές από το κυβικό πλέγμα (χρησιμοποιώντας δομή επιλογής) και σχηματίζουμε τα νανοςύρματα που μελετώνται. Έχουμε την δυνατότητα, λοιπόν, να κατασκευάζουμε νανοςύρματα διαφορετικών γεωμετρικών χαρακτηριστικών. Επίσης, μπορούμε να καθορίσουμε διαφορετικές περιοχές εντός των νανοσυρμάτων και να τους αποδώσουμε διαφορετικές φυσικές ιδιότητες (ενέργεια ανταλλαγής J, ανισοτροπία K, κλπ.). Στην μελέτη αυτή, κατασκευάζονται δυο ειδών νανοςύρματα. Το πρώτο είναι αμιγώς σιδηρομαγνητικό. Επομένως, οι περιοχές που ορίζονται σε αυτή

την δομή, είναι ο σιδηρομαγνητικός πυρήνας και η εξωτερική του επιφάνεια (σχήμα 4.1a). Στη συνέχεια, κατασκευάζεται διμαγνητικό νανοσύρμα. Οι περιοχές που ορίζονται είναι ο σιδηρομαγνητικός πυρήνας, η εξωτερική του επιφάνεια, η εσωτερική επιφάνεια του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού, το κύριο μέρος του φλοιού και η εξωτερική του επιφάνεια (σχήμα 4.1b). Τέλος, μέσω αυτής της υπολογιστικής διαδικασίας, μπορούμε να εισάγουμε στις δομές που μελετώνται και την ενδοεπιφανειακή τραχύτητα (interface roughness). Αυτό επιτυγχάνεται μέσω ενός αλγόριθμου ανάμειξης των ατόμων των δυο μαγνητικών υλικών στην διεπιφάνεια.

Η ολική ενέργεια του συστήματος: Η μαγνητική δομή του συστήματος περιγράφεται, σύμφωνα με το κλασικό πρότυπο του Heisenberg, από την Χαμιλτονιανή [39, 40],

$$H = \sum_i H_i \quad (4.2)$$

με,

$$H_i = H_{\text{anis},i} + H_{\text{zeem},i} + H_{\text{exc},i} + H_{\text{dip},i}. \quad (4.3)$$

Ο πρώτος όρος είναι η ενεργειακή ανισοτροπία του συστήματος και υπολογίζεται από την σχέση,

$$H_{\text{anis},i} = -K_{1i} (\hat{s}_i \cdot \hat{z})^2 \quad (4.4)$$

όπου, το διάνυσμα \hat{s}_i είναι το κλασικό spin στην περιοχή i . Η σταθερά K_{1i} παίρνει τις τιμές K_{FM} και K_{AF} , ανάλογα με την περιοχή στην οποία βρίσκεται το i spin.

Ο δεύτερος όρος είναι η ενέργεια Zeeman, που προκύπτει εξαιτίας της αλληλεπίδρασης των spins του συστήματος με το εξωτερικό πεδίο h . Υπολογίζεται από την σχέση,

$$H_{zeem,i} = -h \left(\hat{s}_i \cdot \hat{z} \right). \quad (4.5)$$

Ο τρίτος όρος είναι η ενέργεια ανταλλαγής (Heisenberg) και υπολογίζεται από την σχέση,

$$H_{exc,i} = -\hat{s}_i \cdot \sum_{\langle j \rangle} J_{ij} \hat{s}_j. \quad (4.6)$$

Κατά αντιστοιχία με τις σταθερές ανισοτροπίας, η σταθερά της ενέργειας ανταλλαγής J_{ij} παίρνει τις τιμές J_{FM} αν και τα δυο spin i και j βρίσκονται στην περιοχή του σιδηρομαγνητικού υλικού, J_{AF} αν βρίσκονται στην περιοχή του αντισιδηρομαγνητικού υλικού και J_{int} αν βρίσκονται στην διεπιφάνεια. Οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν στην μελέτη αυτή, είναι αδιαστατοποιημένες ως προς την σταθερά J_{FM} ($J_{FM}=10$). Αναλυτικότερα, οι τιμές για τις σταθερές ανταλλαγής είναι $J_{AF} = -0.5 J_{FM}$, $J_{int} = -0.5 J_{FM}$ και για τις σταθερές ανισοτροπίας $K_{FM} = 0.1 J_{FM}$ και $K_{AF} = J_{FM}$. Η μεγάλη τιμή της ανισοτροπίας K_{AF} , δικαιολογείται από το γεγονός πως, το αντισιδηρομαγνητικό υλικό σχηματίζει ένα λεπτό περίβλημα γύρω από το σιδηρομαγνητικό υλικό, κάτι που οδηγεί σε υψηλή επιφανειακή ανισοτροπία.

Ο τέταρτος ενεργειακός όρος που εισάγουμε στην μελέτη αυτή, οφείλεται στις διπολικές μαγνητοστατικές αλληλεπιδράσεις. Η σχέση από την οποία υπολογίζεται είναι η,

$$H_{dip,i} = -\hat{s}_i \cdot \sum_j g_{ij} \mathbf{D}_{ij} \hat{s}_j \quad (4.7)$$

με,

$$D_{ij}^{\alpha\beta} \equiv \frac{\delta_{\alpha\beta} - 3r_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta}}{(R_{ij}/a)^3} \text{ (dipolar matrix)}$$

και

$$g_{ij} = \frac{\mu_i \mu_j}{a^3} \text{ (coupling strength).}$$

Οι αλληλεπιδράσεις αυτές είναι μακριάς εμβέλειας. Το άθροισμα, δηλαδή, της σχέσης (4.7), περιλαμβάνει όλους εκείνους τους όρους, που προκύπτουν από την αλληλεπίδραση ενός i κεντρικού ατόμου, με όλα τα υπόλοιπα j άτομα του συστήματος. Το πλήθος των ατόμων του συστήματος, καθιστά τον υπολογισμό του αθροίσματος ένα ιδιαίτερα απαιτητικό υπολογιστικό πρόβλημα. Για να μπορέσουμε να μειώσουμε τον υπολογιστικό χρόνο, καταφεύγουμε στην παρακάτω προσέγγιση για το τοπικό διπολικό πεδίο: Κάνουμε ακριβή υπολογισμό των διπολικών όρων της εξίσωσης (4.7) μεταξύ ατόμων, που βρίσκονται σε απόσταση μικρότερη μιας ακτίνας επιλογής ($|r_i - r_j| < R_0$) από το εκάστοτε κεντρικό άτομο και περιγράφουμε τους υπόλοιπους όρους της εξίσωσης (4.7) σύμφωνα με την προσέγγιση μέσου πεδίου, που προβλέπει την αντικατάσταση της τοπικής ροπής s_j με τη μέση θερμική μαγνητική ροπή $\langle s \rangle$.

Πρωτόκολλο προσομοίωσης: Χρησιμοποιώντας την έκφραση (4.2) για την ενέργεια, εφαρμόζουμε τη μέθοδο Metropolis Monte Carlo (MMC), όπως αυτή περιγράφεται στην παράγραφο 3.3, ακολουθώντας το πρωτόκολλο της προσομοίωσης που περιγράφεται στην επόμενη παράγραφο.

A) Αρχικά, προσομοιώνεται η διαδικασία Ψύξης υπό Πεδίο (field cooling, FC), ώστε να επιτευχθεί η διάταξη των spins του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού που θα οδηγήσει

στην εμφάνιση του φαινομένου Π-Α. Κατά τη διαδικασία αυτή, το σύστημα ψύχεται υπό σταθερό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο παράλληλο στον άξονα εύκολης μαγνήτισης του ΜΝΣ (z-άξονας), που αναφέρεται ως Πεδίο Ψύξης (cooling field), H_{cool} . Το μαγνητικό πεδίο είναι σχετικά ασθενές, δηλαδή, αρκετά μικρότερο από το πεδίο κορεσμού του συστήματος ($H_{cool} \ll H_{sat}$).

Η ψύξη γίνεται από μια αρχική υψηλή θερμοκρασία T_1 , όπου $T_N < T_c < T_1$, μέχρι μια χαμηλή θερμοκρασία T_2 , όπου $T_2 < T_N < T_c$.

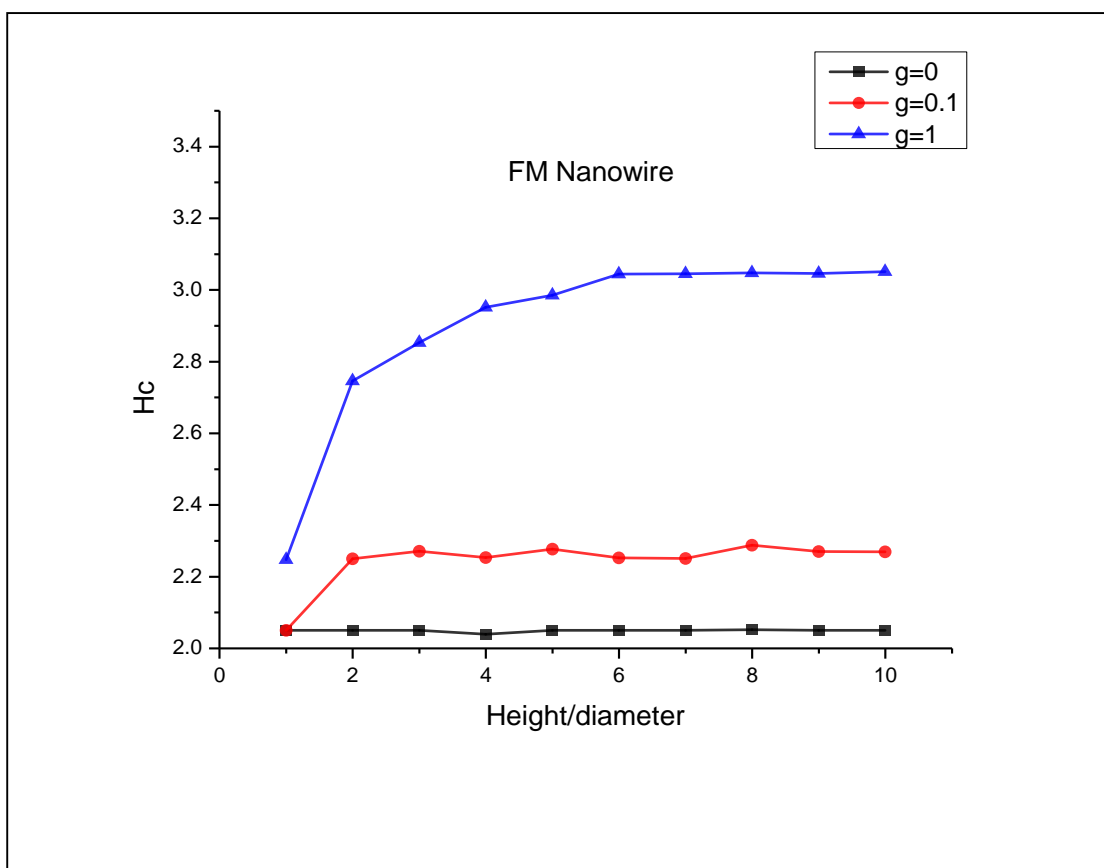
Κατά την ψύξη υπό πεδίο συμβαίνουν τα εξής: Αρχικά, τόσο ο πυρήνας όσο και ο φλοιός είναι σε πλήρη θερμική αταξία λόγω του ότι η T_2 είναι ψηλότερη από τις κρίσιμες θερμοκρασίες. Καθώς η θερμοκρασία μειώνεται και μόλις περνά κάτω από τη θερμοκρασία Curie διατάσσεται πρώτος ο σιδηρομαγνητικός πυρήνας παράλληλα στο πεδίο. Στη συνέχεια, και καθώς το σύστημα περνά κάτω και από τη θερμοκρασία Neel, διατάσσεται και ο αντισιδηρομαγνητικός φλοιός. Επειδή σε χαμηλά πεδία ο αντισιδηρομαγνήτης δεν αποκρίνεται στο εξωτερικό πεδίο, η διάταξη του (αν ήταν ελεύθερος) μπορεί να γίνει κατά δύο ενεργειακά ισοδύναμους τρόπους (εκφυλισμός), που διαφέρουν στην σειρά διαδοχής των πάνω και κάτω spin, σχηματικά (+-+--+) ή (-+--+). Η παρουσία όμως του σιδηρομαγνήτη, που είναι σε σύζευξη με το εσωτερικό στρώμα του αντισιδηρομαγνήτη και είναι ο ίδιος ήδη προσανατολισμένος, επιφέρει άρση του εκφυλισμού στις δύο καταστάσεις του αντισιδηρομαγνήτη και ευνοεί τη διαταξη που ικανοποιεί τις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής μεταξύ των δυο φάσεων.

Β) Στη συνέχεια, το εξωτερικό πεδίο μεταβάλλεται μεταξύ των τιμών $-H_{cool} \leq H \leq +H_{cool}$ 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.

4.3 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ-ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

4.3.1 ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑ

Αρχικά, μελετήθηκε η εξάρτηση του συνεκτικού πεδίου ενός σιδηρομαγνητικού νανοσύρματος ($J_{FM}=10$, $K_{FM}=1$) ακτίνας $R=5a$, για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου αναλογίας (aspect ratio) του νανوسύρματος. Οι αριθμητικοί υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν σύμφωνα με την χαμιλτονιανή 4.2, όπου αρχικά παραλήφθηκε ο όρος $H_{dip,i}$ (διπολικές αλληλεπιδράσεις) και εν συνεχεία επαναλήφθηκαν συμπεριλαμβανομένου και το όρου αυτού. Μέσω της σύγκρισης των αποτελεσμάτων, γίνεται κατανοητή η εξάρτηση των φαινομένων υστέρησης του σιδηρομαγνητικού νανوسύρματος από τις διπολικές αλληλεπιδράσεις. Τα αποτελέσματα απεικονίζονται στο σχήμα 4.2.

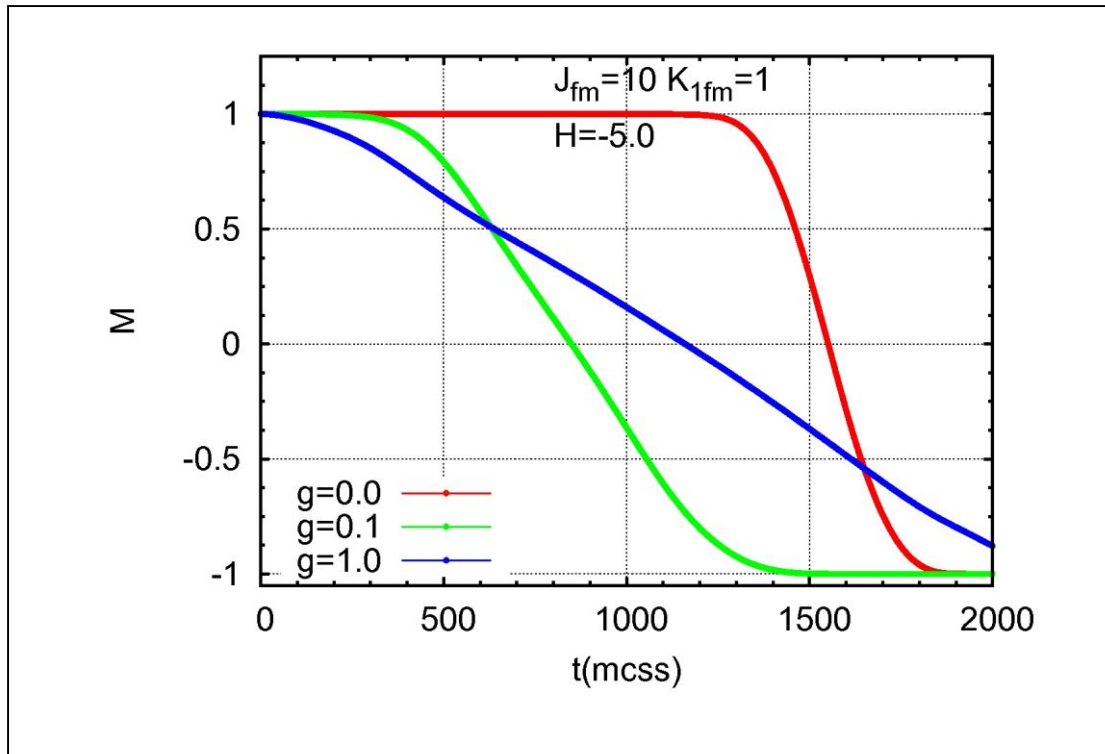


Σχήμα 4.2 Εξάρτηση του συνεκτικού πεδίου (ανισοτροπίας) σιδηρομαγνητικού νανوسύρματος ($D=10a$), από την παράμετρο αναλογίας (aspect ratio). Η θερμοκρασία στην οποία μελετήθηκε το σύστημα, είναι $T = 0.1J/k_B$.

Παρατηρούμε πως, απουσία των διπολικών αλληλεπιδράσεων, το συνεκτικό πεδίο (H_c) παραμένει σταθερό με την αύξηση του ύψους του νανοσύρματος. Αντίθετα, όταν $g \neq 0$, παρατηρείται μια αύξηση του συνεκτικού πεδίου με την αύξηση του ύψους, ιδιαίτερα στα μικρά ύψη. Η αύξηση αυτή είναι δικαιολογημένη καθώς, αυξανόμενου του μήκους στα κυλινδρικά συστήματα, η μαγνητοστατική ενέργεια ελαχιστοποιείται με τον παράλληλο στον άξονα του κυλίνδρου (z -άξονα) προσανατολισμό των διπόλων. Επομένως, για να στραφούν τα δίπολα μακριά από τον άξονα- z , απαιτείται μεγαλύτερη ενέργεια, γεγονός που οδηγεί σε μεγαλύτερο συνεκτικό πεδίο. Επίσης, παρατηρούμε ότι το συνεκτικό πεδίο αυξάνεται καθώς αυξάνεται και η ένταση των διπολικών αλληλεπιδράσεων. Οι διπολικές αλληλεπιδράσεις, λοιπόν, εισάγουν έναν ακόμα παράγοντα ανισοτροπίας στο σύστημα (μονοαξονική ανισοτροπία). Η απότομη αύξηση του συνεκτικού πεδίου δεν παρατηρείται σε μεγάλα ύψη, όπου η ανισοτροπία σχήματος προσεγγίζει μια οριακή τιμή. Επίσης, παρατηρούμε πως όσο πιο ισχυρές είναι οι διπολικές αλληλεπιδράσεις, τόσο πιο μεγάλο είναι το ύψος του νανοσύρματος στο οποίο προσεγγίζεται αυτή η οριακή τιμή του H_c . Το φαινόμενο αυτό σχετίζεται με την αύξηση του μήκους συσχέτισης του συστήματος (correlation length) κατά την αύξηση του παράγοντα g . Η συμπεριφορά που απεικονίζεται στο σχήμα 4.2, είναι σε συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα των Skomski et al.[41].

Στη συνέχεια, μελετάται ο μηχανισμός αντιστροφής της μαγνήτισης κατά την ανταπόκριση σιδηρομαγνητικών νανοσυρμάτων σε εξωτερικό πεδίο. Στο σχήμα 4.3, απεικονίζεται η καμπύλη εφησυχασμού του σιδηρομαγνητικού σύρματος για ένα πεδίο αντιστροφής, για τις τρεις τιμές της παραμέτρου g που μελετώνται. Παρατηρούμε, πως για κάθε τιμή της παραμέτρου g προκύπτει και μια διαφορετικής μορφής καμπύλη εφησυχασμού. Μπορούμε, λοιπόν, να βγάλουμε το φαινομενολογικό συμπέρασμα, πως ο μηχανισμός αντιστροφής της μαγνήτισης, στις περιπτώσεις αυτές, είναι διαφορετικός και εξαρτάται από την ισχύ των μαγνητοστατικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατομικών spins. Οι διαφορές του μηχανισμού αντιστροφής της μαγνήτισης για τις τρεις αυτές περιπτώσεις, πρέπει να αναζητηθούν μικροσκοπικά.

Στο σχήμα 4.4, απεικονίζεται η μαγνήτιση του σιδηρομαγνητικού νανοσύρματος μήκους $L=50a$ σε εξωτερικό πεδίο (περίπου) ίσο με το συνεκτικό, κατά μήκος του άξονα- z για διαφορετικές χρονικές στιγμές. Το σύστημα μελετάται παρουσία διπολικών αλληλεπιδράσεων ($g=0.1$ και 1) και απουσία αυτών.



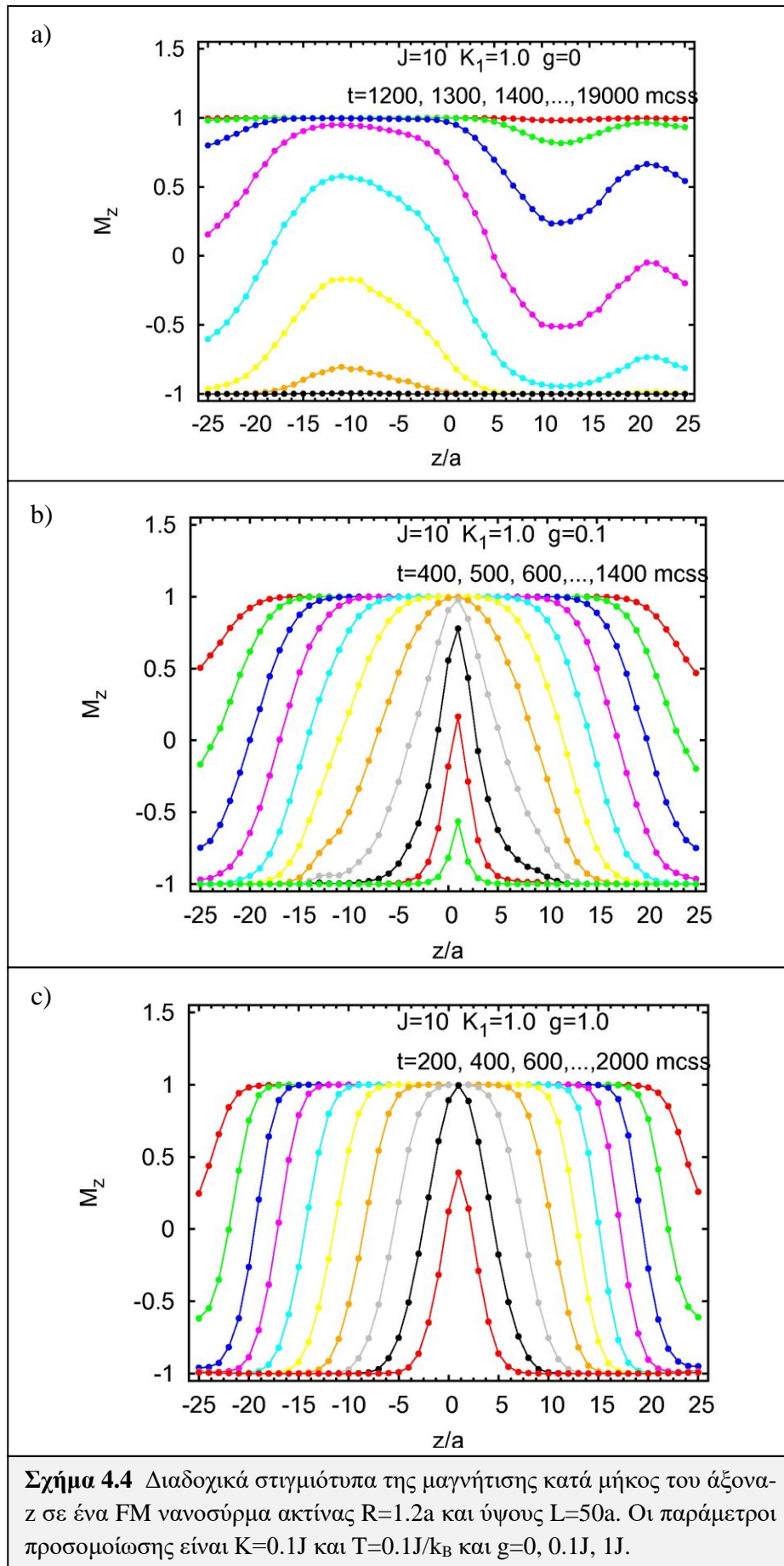
Σχήμα 4.3 Απεικόνιση της μαγνήτισης συναρτήσει του αριθμού των MCSS (καμπύλης εφυσχασμού) σε ένα σιδηρομαγνητικό νανοσύρμα με ακτίνα $R=1.2a$ και ύψος $L=50a$, a) απουσία διπολικών αλληλεπιδράσεων ($g=0$) και b) με διπολικές αλληλεπιδράσεις ($g=0.1, 1$).

Παρατηρούμε από το σχήμα 4.4a), πως η αντιστροφή της μαγνήτισης ξεκινάει τόσο από τα άκρα (nucleation) όσο και από το κέντρο του νανοσύρματος. Αυτή η συμπεριφορά, συνεχίζεται και σε μεγαλύτερες χρονικές στιγμές (μεγαλύτερο αριθμό MCSS). Επομένως, όταν $g=0$, η αντιστροφή της μαγνήτισης κατά μήκος του άξονα-z είναι ανομοιομορφή.

Από το σχήμα 4.4b), όπου στους υπολογισμούς συμπεριλαμβάνονται και οι διπολικές αλληλεπιδράσεις, παρατηρούμε πως η αντιστροφή της μαγνήτισης είναι πιο ομαλή και πραγματοποιείται με τον σχηματισμό τοιχωμάτων Bloch, που ξεκινούν μόνο από τα άκρα και στη συνέχεια επεκτείνονται προς το κέντρο του σύρματος όπου και συγχωνεύονται, οδηγώντας στην πλήρη αντιστροφή της μαγνήτισης. Πρέπει να σημειωθεί, πως λόγω συμμετρίας αναμένουμε τον ταυτόχρονο σχηματισμό των δυο τοιχωμάτων, που απεικονίζεται στο σχήμα. Επίσης, παρατηρούμε πως οι αποστάσεις τις οποίες δια-

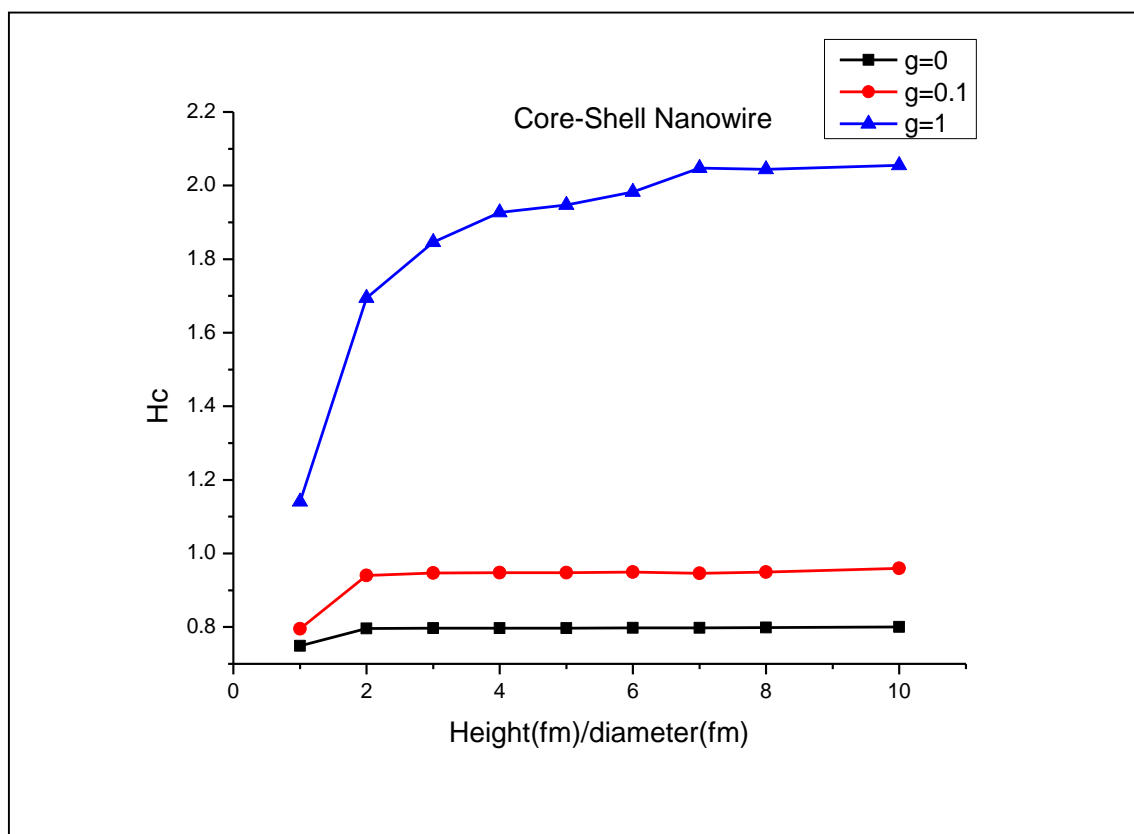
νύουν τα δυο αντικριστά τοιχώματα Bloch, σε ίσες χρονικές περιόδους, είναι ίσες. Επομένως, συμπεραίνουμε πως τα δυο τοιχώματα διαδίδονται εντός του σύρματος με ίσες κατά μέτρο ταχύτητες. Από το σχήμα εκτιμάμε ότι $u \sim 0.05a/MCSS$.

Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρείται και στο σχήμα 4.4c). Η διαφορά σε αυτή την περίπτωση, έγκειται στην πιο απότομη μετάβαση από τη μια μαγνητική περιοχή στην άλλη. Τα τοιχώματα Bloch, δηλαδή, έχουν πιο μικρό εύρος. Τέλος, η ταχύτητα των δυο τοιχωμάτων είναι πιο μικρή σε αυτή την περίπτωση, γεγονός που βρίσκεται σε συμφωνία με την παρατήρηση του σχήματος 4.3, πως η μαγνήτιση του συστήματος με $g=0.1$ ολοκληρώνεται γρηγορότερα.



4.3.2 ΔΙΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΝΑΝΟΣΥΡΜΑ

Στη συνέχεια, μελετάται το σύστημα του διμαγνητικού νανοσύρματος, εσωτερικής ακτίνας $R_{\text{core}} = 5a$ και εξωτερικής $R_{\text{ext}} = 8a$. Τα αποτελέσματα απεικονίζονται στα σχήματα 4.5 και 4.6.



Σχήμα 4.5 Εξάρτηση του συνεκτικού πεδίου διμαγνητικού νανοσύρματος ($D = 10a$), από την παράμετρο αναλογίας (aspect ratio). Η θερμοκρασία στην οποία μελετήθηκε το σύστημα, μετά την διαδικασία ψύξης υπό πεδίο (F.C), είναι $T = 0.1J/k_B$.

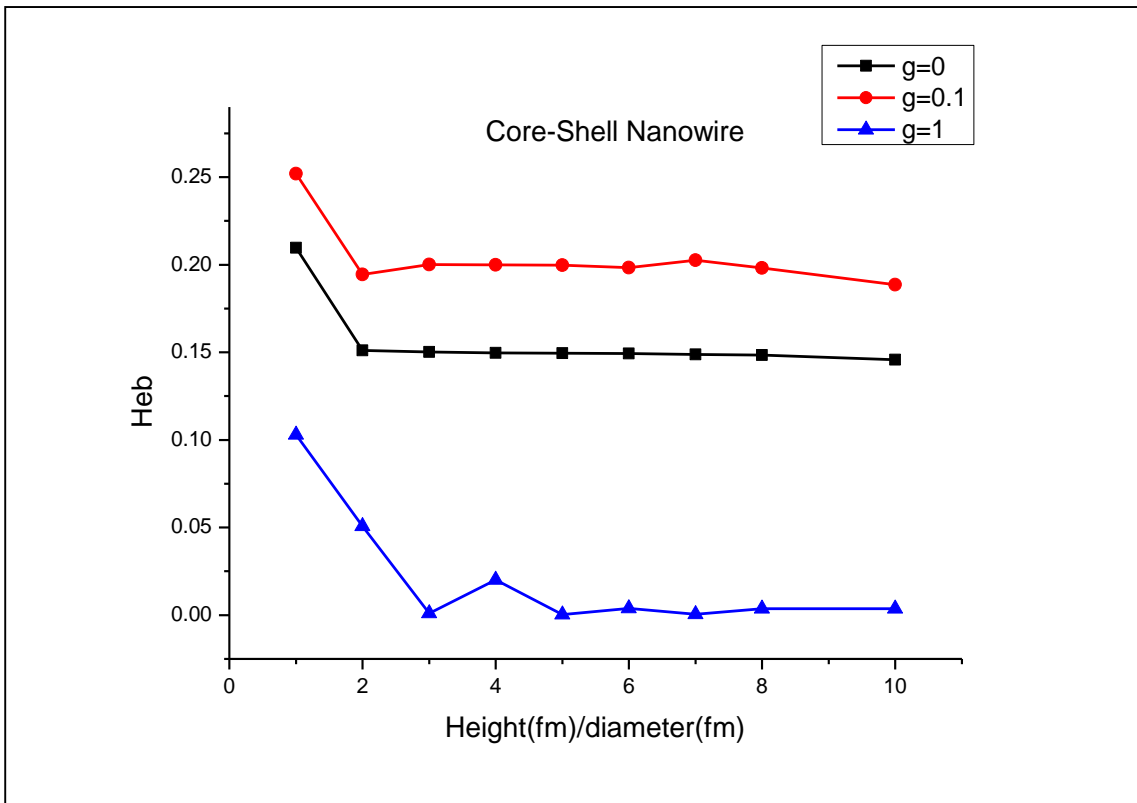
Παρατηρούμε από το σχήμα 4.5, αντίστοιχη με το σιδηρομαγνητικό νανοσύρμα, αύξηση του συνεκτικού πεδίου με το μήκος των νανοσυρμάτων, παρουσία διπολικών αλληλεπιδράσεων. Απουσία αυτών, το συνεκτικό πεδίο παραμένει σταθερό για τιμές της παραμέτρου $H_{\text{fm}} / D_{\text{fm}}$ μεγαλύτερες της τιμής 2.

Στο σχήμα 4.6, απεικονίζεται η μεταβολή του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής συναρτήσει της παραμέτρου $H_{\text{fm}} / D_{\text{fm}}$. Απουσία διπολικών αλληλεπιδράσεων (μαύρη καμπύλη), παρατηρούμε μια μείωση του πεδίου στα μικρά ύψη, ενώ καθώς η τιμή της παραμέτρου

H_{fm} / D_{fm} αυξάνεται, παρατηρείται σταθεροποίηση της τιμής του πεδίου. Η συμπεριφορά αυτή είναι αναμενόμενη, αφού το φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής είναι επιφανειακό φαινόμενο, δηλαδή, ισχύει ότι

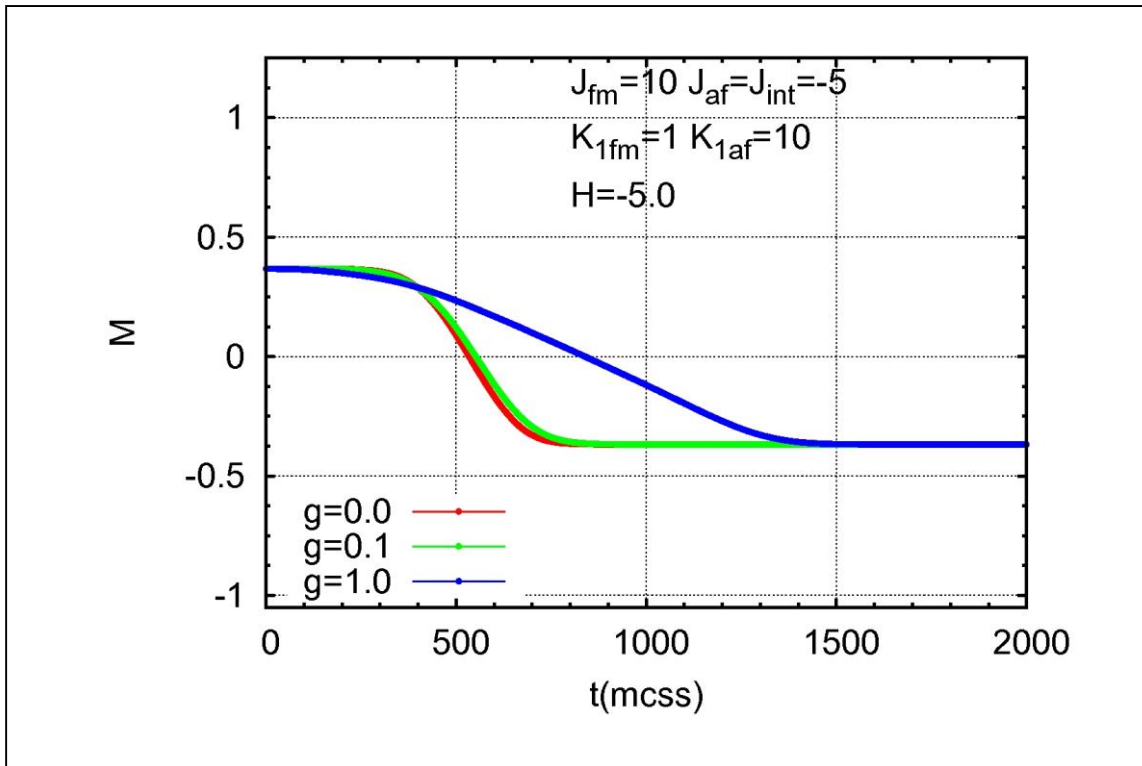
$$H_{eb} \sim \frac{S}{V} = \frac{1}{L} + \frac{1}{R}$$

με S το εμβαδόν της ενδοεπιφάνειας των δυο υλικών και V τον όγκο του σιδηρομαγνητικού πυρήνα. Επομένως, περιμένουμε η συνεισφορά των δυο βάσεων του κυλίνδρου στα φαινόμενα υστέρησης και στο πεδίο πόλωσης ανταλλαγής να είναι έντονη στα χαμηλά ύψη, ενώ στα μεγάλα ύψη να είναι αμελητέα.



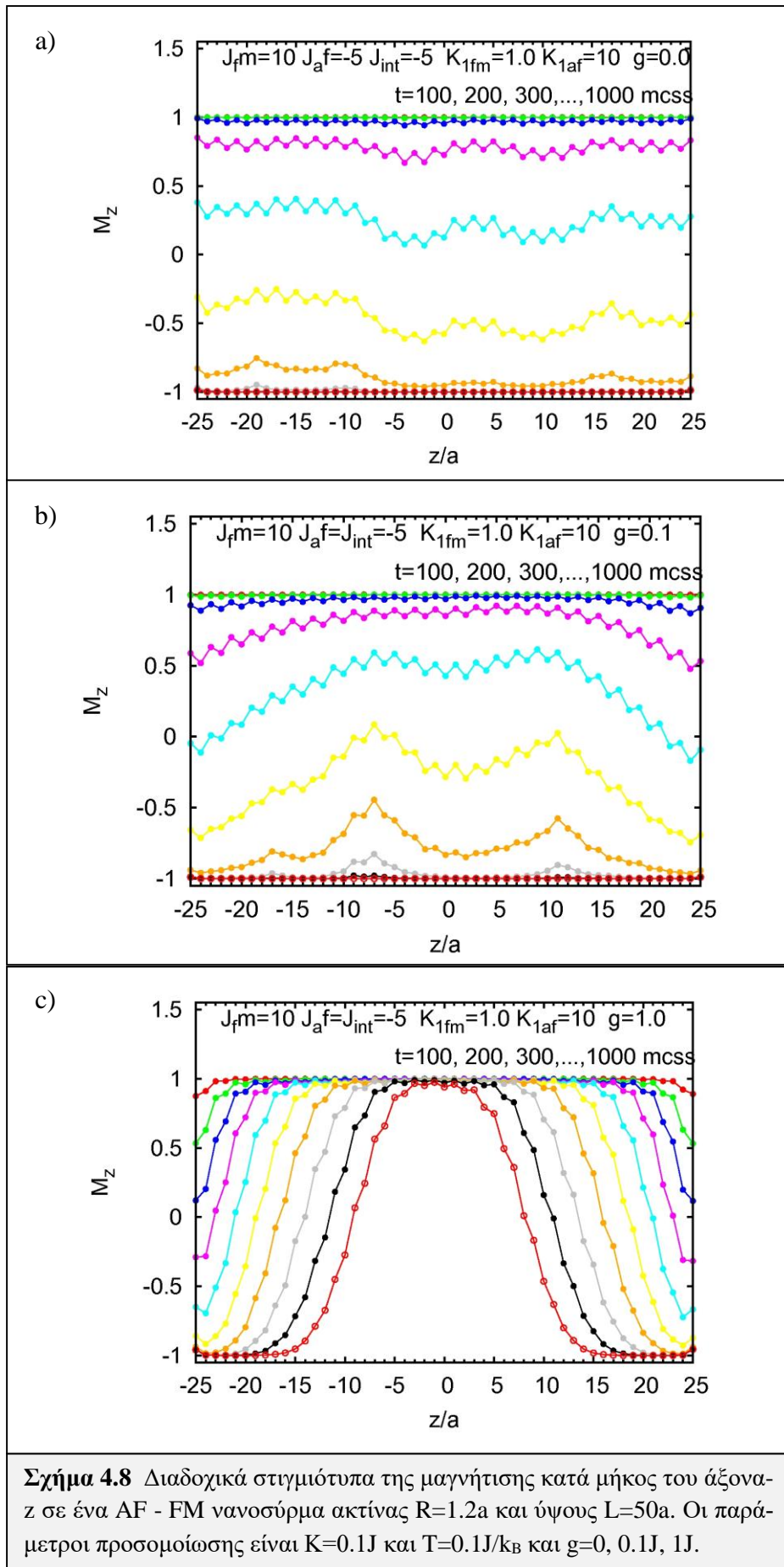
Σχήμα 4.6 Εξάρτηση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής διμαγνητικού νανοσύρματος ($D=10a$), από την παράμετρο αναλογίας (aspect ratio). Η θερμοκρασία στην οποία μελετήθηκε το σύστημα, μετά την διαδικασία ψύξης υπό πεδίο (F.C), είναι $T = 0.1J/k_B$.

Παρουσία των διπολικών αλληλεπιδράσεων ($g=0.1$, κόκκινη καμπύλη), το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής εμφανίζει μια αντίστοιχη, με την μαύρη καμπύλη, μείωση στα μικρά ύψη, που δεν παρατηρείται στα μεγάλα, όπου το μέτρο του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής σταθεροποιείται. Για $g=1$ (μπλε καμπύλη), παρατηρούμε πως το H_{eb} ελαττώνεται με την αύξηση ύψους του νανοσύρματος, μέχρις ότου, να μηδενιστεί. Επομένως, τα συστήματα, με $g=0$ και $g=0.1$, παρουσιάζουν παρόμοια συμπεριφορά, σε αντίθεση με το σύστημα με $g=1$, που παρουσιάζει μια ξεκάθαρη διαφοροποίηση. Η διαφορετική συμπεριφορά μεταξύ των συστημάτων $g=0, 0.1$ και $g=1$, αποτυπώνεται και στις καμπύλες εφησυχασμού των τριών συστημάτων, που απεικονίζονται στο σχήμα 4.7. Η διαφοροποίηση αυτή, πρέπει να αναζητηθεί μικροσκοπικά.



Σχήμα 4.7 Απεικόνιση της μαγνήτισης συναρτήσει του αριθμού των MCSS (καμπύλης εφησυχασμού) σε ένα AF - FM διμαγνητικό νανοσύρμα με ακτίνα $R=1.2a$ και ύψος $L=50a$, a) απουσία διπολικών αλληλεπιδράσεων ($g=0$) και b) με διπολικές αλληλεπιδράσεις ($g=0.1, 1$).

Στο σχήμα 4.8, απεικονίζεται το προφίλ της μαγνήτισης κατά μήκος του άξονα-z για τις τρεις περιπτώσεις.

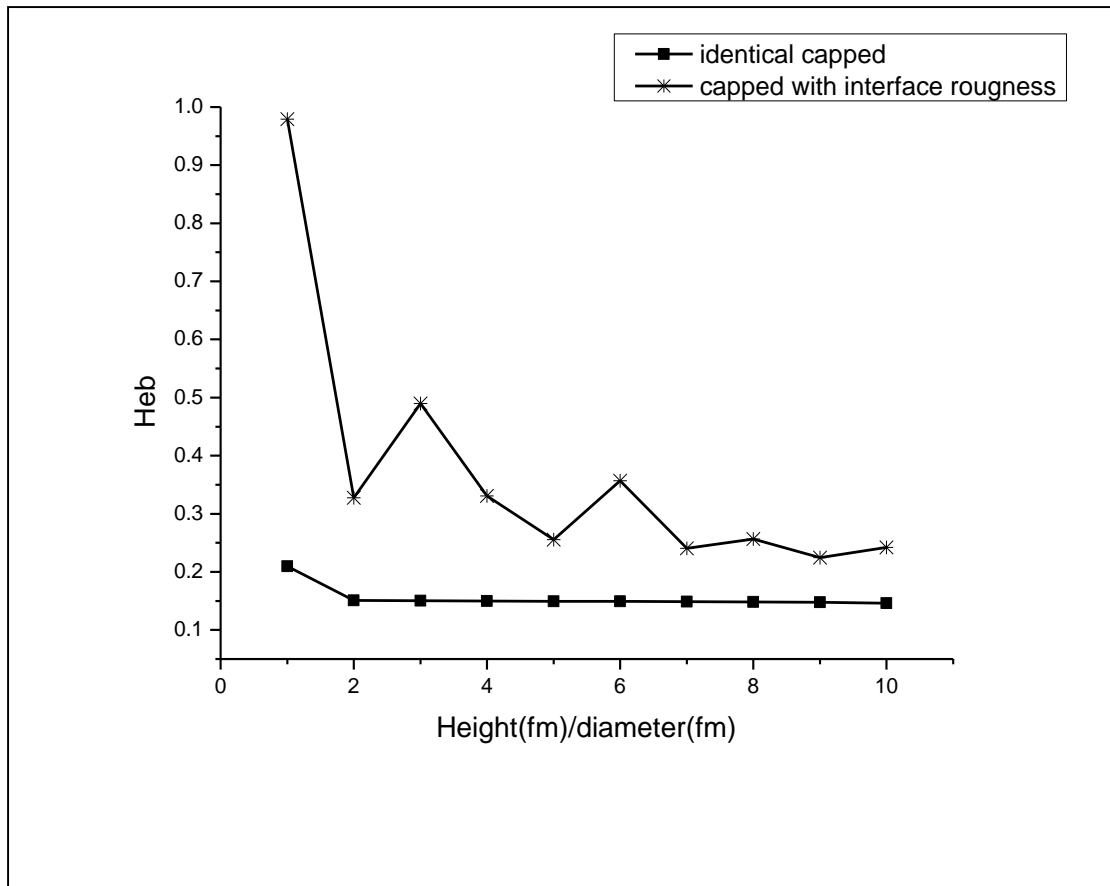


Παρατηρούμε πως, στα συστήματα με $g=0$ και $g=0.1$ η αντιστροφή της μαγνήτισης πραγματοποιείται ταυτόχρονα από όλα τα σημεία του άξονα-z. Η περιστροφή των spins του σιδηρομαγνητικού υλικού, δηλαδή, γίνεται με σύμφωνο τρόπο (coherent rotation). Επομένως, το σύστημα συμπεριφέρεται σύμφωνα με το πρότυπο των Meiklejohn-Bean. Ακόμα, διαπιστώνουμε πως η παρουσία του αντισιδηρομαγνητικού φλοιού στα άκρα του νανοσύρματος, στην περιοχή δηλαδή απ' όπου ξεκινάει η δημιουργία των τοιχωμάτων Bloch, θωρακίζει τα ελεύθερα άκρα του σιδηρομαγνητικού πυρήνα και δυσχεραίνει το σχηματισμό των σιδηρομαγνητικών περιοχών.

Στο σύστημα, με $g=1$, η μαγνήτιση αντιστρέφεται μέσω του σχηματισμού τοιχωμάτων Bloch, όπως και στο σιδηρομαγνητικό σύρμα. Το αποτέλεσμα, είναι σε συμφωνία με την ελάττωση που παρατηρήθηκε στην τιμή του H_{eb} στο σχήμα 4.6. Η ταχύτητα διάδοσης των τοιχωμάτων είναι περίπου η διπλάσια εκείνης που προκύπτει στο FM σύρμα ($u_{AF-FM} \sim 2u_{FM}$). Συμπεραίνουμε, λοιπόν, πως μόνο σε συστήματα με ισχυρές διπολικές αλληλεπιδράσεις ($g=K$), παρατηρείται ο σχηματισμός τοιχωμάτων Bloch και μαγνητικών περιοχών.

Στη συνέχεια, μελετάμε τη συνεισφορά της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας (interface roughness) στο φαινόμενο πόλωσης ανταλλαγής. Στο σχήμα 4.7, απεικονίζεται το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής συναρτήσει του ύψους για το ιδανικό σύστημα (core-shell nanowire) αλλά και για το σύστημα όπου συμπεριλαμβάνεται η ενδοεπιφανειακή τραχύτητα. Τα δυο συστήματα μελετώνται απουσία διπολικών αλληλεπιδράσεων, έτσι ώστε να εστιάσουμε στη συνεισφορά της τραχύτητας.

Παρατηρούμε πως, λόγω της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας αυξάνει πολύ το πεδίο πόλωσης ανταλλαγής. Η αύξηση αυτή, οφείλεται στην αύξηση του αριθμού των μη ισοσταθμισμένων (uncompensated) spins του συστήματος. Επίσης, από το διάγραμμα του σχήματος 4.7 διαπιστώνουμε πως, η παρουσία της τραχύτητας στις βάσεις ενισχύει πολύ το H_{eb} στα μικρά ύψη.



Σχήμα 4.7 Εξάρτηση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής διμαγνητικού νανοσύρματος, από την παράμετρο αναλογίας (aspect ratio). Η καμπύλη με τα αστέρια απεικονίζει το σύστημα με ενδοεπιφανειακή τραχύτητα, ενώ η καμπύλη με τα τετράγωνα το ιδανικό σύστημα. Η θερμοκρασία στην οποία μελετήθηκαν τα συστήματα, μετά την διαδικασία ψύξης υπό πεδίο (F.C), είναι $T = 0.1J/k_B$. Για το νανοσύρμα με επιφανειακή τραχύτητα χρησιμοποιήθηκαν $N_s=9$ δείγματα με διαφορετικούς (τυχαίους) σχηματισμούς της επιφανειακής τραχύτητας.

4.4 ΣΥΝΟΨΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Συνοψίζοντας, διαπιστώθηκε πως κατά την ανταπόκριση μαγνητικών νανοσυρμάτων σε εξωτερικό πεδίο, σχηματίζονται τοιχώματα Bloch, που ξεκινούν από τα άκρα του νανοσύρματος και εν συνεχεία διαδίδονται στο εσωτερικό του, με αποτέλεσμα την δημιουργία σιδηρομαγνητικών περιοχών εντός του νανοσύρματος. Επίσης, διαπιστώθηκε πως η παρουσία των διπολικών αλληλεπιδράσεων, οδηγεί σε αύξηση της ανισοτροπίας

των μαγνητικών νανοσυρμάτων (σιδηρομαγνητικών και διμαγνητικών) καθώς αυξάνεται η παράμετρος αναλογίας (aspect ratio). Ακόμα, παρατηρήθηκε σταθεροποίηση του μέτρου του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής με την αύξηση του ύψους, σε διμαγνητικά νανوسύρματα. Μόνο σε συστήματα με ισχυρές διπολικές αλληλεπιδράσεις ($g=K$), παρατηρήθηκε ελάττωση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής, που οφείλεται στο σχηματισμό σιδηρομαγνητικών περιοχών. Τέλος, παρατηρήθηκε αύξηση του πεδίου πόλωσης ανταλλαγής εξαιτίας της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας, που οφείλεται στην αύξηση των μη ισοσταθμισμένων spins του συστήματος.

4.5 ΠΡΟΟΠΤΙΚΕΣ

Η μελέτη που πραγματοποιήθηκε στα πλαίσια αυτής της εργασίας, αποτελεί την αρχή για περαιτέρω διεξοδική διερεύνηση θεμάτων που σχετίζονται με τη μαγνητική υστέρηση σύνθετων μαγνητικών νανοσυρμάτων με μορφολογία πυρήνα-φλοιού και σχετικών σχεδόν-μονοδιάστατων νανοδομών. Ανάμεσα στα θέματα αυτά συγκαταλέγονται και τα παρακάτω:

- Η διερεύνηση του μηχανισμού αντιστροφής της μαγνήτισης σε σύνθετα νανوسύρματα.
- Η μελέτη του ρόλου της ενδοεπιφανειακής τραχύτητας στη διαμόρφωση του μηχανισμού αντιστροφής και η σύνδεση με τις παρατηρούμενες τιμές H_c , H_{eb} .
- Η μελέτη της θερμικής εξάρτησης των πεδίων H_c και H_{eb} .
- Σε τεχνικό επίπεδο, επιβάλλεται η βελτίωση του αλγόριθμου υπολογισμού των διπολικών αλληλεπιδράσεων, πέρα από την προσέγγιση του μέσου πεδίου και η κατάλληλη κωδικοποίηση (πχ παραλληλισμός των διαδικασιών).
- Η ανεύρεση παραμέτρων (ανταλλαγής και ανισοτροπίας) των υλικών που εξηγεί την αύξηση του συνεκτικού πεδίου, λόγω του φαινομένου πόλωσης ανταλλαγής, όπως δείχνουν αρκετά πειραματικά αποτελέσματα.
- Τέλος, η επέκταση της μελέτης σε παραπλήσιες ενδιαφέρουσες δομές όπως μερικά-οξειδωμένα νανوسύρματα, πολυστρωματικά σύρματα (multi-segmented nanowires) και νανοσωλήνες (nanotubes).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ- ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] Σ. Γλένης, ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΙΣ ΙΙ, ΜΑΓΝΗΤΙΣΜΟΣ, ΤΕΥΧΟΣ Ι, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ, ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ, ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ, σελ. 5-7, 24-25, 35-42.
- [2] N. W Ashcroft, N.D. Mermin, Solid state Physics, Cornell University (1976), p. 644-650, 672-687.
- [3] R. C. O’Hanldey, MODERN MAGNETIC MATERIALS Principals and Applications, Massachusetts Institute of Technology p. 14-26, 80-96, 96-99, 110-120, 274-308.
- [4] B. D. Cullity, C. D. Graham, INTRODUCTION TO MAGNETIC MATERIALS second edition, IEEE Press, p. 115-238, 275-300, 309-405.
- [5] S. Chikazumi, Physics Of Ferromagnetism, OXFORD SCIENCE PUBLICATIONS, p. 3-32, 107-159, 249-339, 387-464.
- [6] D. Kechrakos, Magnetic Nanoparticle Assemblies, School of Pedagogical and Technological Education, p. 22.1-22.15.
- [7] L. Neel, Influence de fluctuations thermiques sur l’ aimantation de grains ferromagnetiques tres fins. Compt. Rend. 228, 664-666 1949.
- [8] E. C Stoner and E. P. Wohlfarth, A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys. Proc. R. Soc. Lond. A 240, 599-642 (1948).
- [9] C.P. Bean and J. D. Livingston. Superparamagnetism. J. Appl. Phys. 30, 120-129 (1959).
- [10] Β. Τζιτζιός, ΧΗΜΙΚΗ ΣΥΝΘΕΣΗ ΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ, Ινστιτούτο Επιστήμης Υλικών.
- [11] N. A. Frey, S. Peng, K. Cheng, S. Sun. Magnetic nanoparticles: synthesis, functionalization and applications in bio imaging and magnetic energy storage. Chem. Soc. Rev. 38(9), 2532-2542 (2009).
- [12] Α. Πατσόπουλος. ΦΥΣΙΚΗ ΤΩΝ ΗΜΙΑΓΩΓΙΚΩΝ ΕΤΕΡΟΔΟΜΩΝ-ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΟΥ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΟΥ ΑΕΡΙΟΥ. Ε.Κ.Π.Α, Τμήμα Φυσικής, Τομέας Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Αθήνα 2013, σελ. 19-21.
- [13] Γ.Π Τριμπέρης, Φυσική των Ημιαγωγών (2013), σελ. 6-8.

- [14] A. Moser, K. Takano, D. T. Margulies et al. Magnetic recording: Advancing into the future. *J. Phys. D Appl. Phys.* 35, 157-167 (2002).
- [15] F. Radu, H. Zabel. Exchange Bias Effect of Ferro-Antiferromagnetic Heterostructures, *SPRINGER TRACTS IN MODERN PHYSICS* 227, 97-184 (2007).
- [16] J. Nogues, I. K. Shuller. Exchange Bias. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 192, 203-232 (1999).
- [17] M. Kiwi. Topical Review Exchange bias theory. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 234, 584-595 (2001).
- [18] W. P. Meiklejohn, C. P. Bean, *Phys. Rev.* 102, 1413 (1956).
- [19] K. Takano, R. H. Kodama, A. E. Berkowitz, W. Cao, and G. Thomas. Interfacial uncompensated antiferromagnetic spins: Role in unidirectional anisotropy in polycrystalline Ni₈₁Fe₁₉/CoO bilayers. *Phys. Rev. Lett.* 79(6), 1130-1133, 109, 142 (1997).
- [20] L. Neel. Etude theorique du couplage ferro-antiferromagnetique dans les couches minces. *Ann. Phys. (Paris)* 2, 61, 121, 143, 152 (1967).
- [21] A. P. Malozemoff. Random-field model of exchange anisotropy at rough ferromagnetic-antiferromagnetic interfaces. *Phys. Rev. B.* 35, 3679, 98, 109, 110, 122, (1987).
- [22] A. P. Malozemoff. Mechanisms of exchange anisotropy (invited). *J. Appl. Phys.* 63(8), 3874-3879, 98, 122 (1988).
- [23] A. P. Malozemoff. Heisenberg-to-Ising crossover in a random-field model with uniaxial anisotropy. *Phys. Rev. B.* 37(13), 7673-7679, 98, 109, 122 (1988).
- [24] D. Mauri, H. C. Siegmann, P. S. Bagus, and E. Kay. Simple model for thin ferromagnetic films exchange coupled to an antiferromagnetic substrate. *J. Appl. Phys.* 62, 3047, 98, 122, 124, 130, 131, 133 (1987).
- [25] U. Nowak, A. Misra, and K. D. Usadel. Domain state model for exchange bias. *J. Appl. Phys.* 89(11), 7269-7271, 98, 125 (2001).
- [26] B. Beckmann, U. Nowak, and K. D. Usadel. Asymmetric reversal modes in ferromagnetic/antiferromagnetic multilayers. *Phys. Rev. Lett.* 91, 187201, 98, 120, 125, 130, 161 (2003).

- [27] R. L. Stamps. Mechanisms for exchange bias. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 33, 247, 98, 109, 132, 135, 137 (2000).
- [28] F. Radu. Fundamental aspects of exchange bias effect. PhD thesis, Ruhr-University Bochum (2005), p. 111, 139, 157.
- [29] M. E. J. NEWMAN, G. T. BARKEMA, Monte Carlo Methods in Statistical Physics, OXFORD UNIVERSITY PRESS, 2001, p. 3-53.
- [30] K. Binder, D. Stauffer, A Simple Introduction to Monte Carlo Simulation and Some Specialized Topics, p. 1-35.
- [31] L. D. Landau, E. M. Lifshitz: Statistical Physics, Pergamon Press, London 1959, p. 284-300.
- [32] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* 21, 1087 (1953).
- [33] Μ. ΚΟΛΛΙΓΡΗ, ΜΕΛΕΤΗ ΤΟΥ ΣΙΔΗΡΟΜΑΓΝΗΤΙΣΜΟΥ ΚΑΙ ΤΟΥ ΥΠΕΡΠΑΡΑΜΑΓΝΗΤΙΣΜΟΥ ΜΕ ΤΗ ΘΕΩΡΙΑ ΜΕΣΟΥ ΠΕΔΙΟΥ ΚΑΙ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ MONTE CARLO, Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία, Αθήνα 2004, σελ. 20-24.
- [34] K. Chen, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Static critical behavior of three-dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study, *Phys. Rev B* 48 (5), 3249-3256 (1993).
- [35] M. J. Benitez, O. Petravic, E. L. Salabas, F. Radu, H. Tuysuz, F. Schuth and H. Zabel. Evidence for Core-Shell Magnetic Behavior in Antiferromagnetic Co₃O₄ Nanowires. *Phys. Rev. Lett* 101, 097206 (2008).
- [36] T. Maurer, F. Zighem, F. Ott, G. Chaboussant, and G. André, Y. Soumare and J.-Y. Piquemal, G. Viau, C. Gatel. Exchange bias in Co/CoO core-shell nanowires: Role of antiferromagnetic superparamagnetic fluctuations. *Phys. Rev. B* 80, 064427 (2009).
- [37] M. P. Proenca, J. Ventura, C. T. Sousa, M. Vazquez and J. P. Araujo. Exchange bias, training effect, and bimodal distribution of blocking temperatures in electrodeposited core-shell nanotubes. *Phys. Rev. B* 87, 134404 (2013).
- [38] Ò. Iglesias, A. Labarta, and X. Batlle. Exchange Bias Phenomenology and Models of Core/Shell Nanoparticles. *Journa of Nanoscience and Nanotechnology* 8, 2761–2780, (2008).

- [39] V. Russier, Calculated magnetic properties of two-dimensional arrays of nanoparticles at vanishing temperature, *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS* VOLUME 89 (2), 1287-1294 (2001).
- [40] D. Kechrakos, V. Dimitriadis, O. Chubykalo-Fesenko, V. Tsiantos, Shape-dependent exchange bias effect in magnetic nanoparticles with core-shell morphology, *Phys. Rev. B* 92, 064420 (2015).
- [41] D. J. Sellmyer, M. Zheng and R. Skomski. Magnetism of Fe, Co and Ni nanowires in self-assembled arrays. *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 433–460 (2001).