



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

**ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ**

**ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΝΑΝΟΕΠΙΣΤΗΜΗΣ
ΚΑΙ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ**

**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ**



Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

Προσομοίωση διαδικασίας μαγνήτισης με τεχνικές μικρομαγνητισμού

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

της Στεφανή Χριστίνας

Ερευνητικός Επιβλέπων:

Ε. Χριστοφόρου
Σχολή Μηχανικών Μεταλλείων
Μεταλλουργών, Ε.Μ.Π.

Ακαδημαϊκός Επιβλέπων:

Κ. Παρασκευαΐδης
Τομέας Φυσικής, ΣΕΜΦΕ,
Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Μάρτιος 2015

Ευχαριστίες

Η ολοκλήρωση της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας θα ήταν αδύνατη χωρίς την πολύτιμη υποστήριξη του επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Ευάγγελου Χριστοφόρου, Καθηγητή Ηλεκτρονικών Υλικών του Τομέα Μεταλλουργίας και Τεχνολογίας Υλικών της Σχολής Μηχανικών Μεταλλείων – Μεταλλουργών ΕΜΠ. Θα ήθελα να τον ευχαριστήσω θερμά για την επίβλεψη, την καθοδήγηση, τις συμβουλές και την αμέριστη συμπαράσταση του κατά τη διάρκεια της παρούσας εργασίας. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά την Μαγγιάρου Ελένη, Υποψήφια Διδάκτορα της Σχολής Μηχανικών Μεταλλείων – Μεταλλουργών ΕΜΠ για την οργάνωση και επίβλεψη της εργασίας, για την άριστη συνεργασία που είχαμε στα πλαίσια εκπόνησης αυτής της εργασίας και για όλη τη βοήθεια που μου προσέφερε. Ευχαριστώ πολύ, όλα τα μέλη της ομάδας του εργαστηρίου Μεταλλογνωσίας και Τεχνολογίας Υλικών, για τη βοήθεια και τις συμβουλές τους στα δύσκολα στάδια της εργασίας αυτής και ιδιαιτέρως, την Διδάκτορα Πολυξένη Βουρνά για την σημαντική της συμβολή. Ιδιαίτερες ευχαριστίες στον Νεοκλή Χατζηγεωργίου, Υποψήφιο Διδάκτορα της Σχολής Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών ΕΜΠ, για την καθοριστική βοήθεια του, την προθυμία του και τον πολύτιμο χρόνο που διέθεσε. Βαθιά ευχαριστώ την κ. Αφροδίτη Κτενά, Αν. Καθηγήτρια του Τμήματος Ηλεκτρολόγων Μηχανικών ΤΕ, ΤΕΙ Χαλκίδας, για τις εύστοχες παρατηρήσεις της και τις πολύτιμες επιστημονικές συμβουλές της. Τέλος, θέλω να ευχαριστήσω τους γονείς μου, Νίκο και Καίτη, οι οποίοι υπήρξαν πάντα ένα ανεκτίμητο στήριγμα για μένα, και στους οποίους οφείλω όλη τη διαδρομή των σπουδών μου μέχρι σήμερα.

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται μια μέθοδος προσομοίωσης της ολικής μαγνήτισης ενός υλικού σε συνάρτηση με το επιβαλλόμενο εξωτερικό πεδίο, βασισμένη στη θεωρία του μικρομαγνητισμού.

Η αλληλεπίδραση μεταξύ των μαγνητικών ιδιοτήτων των υλικών και της μικροδομής τους είναι πολύπλοκη και δεν μπορεί να αντιμετωπισθεί πλήρως με τη θεωρία του μικρομαγνητισμού. Αντί αυτού, είναι αναγκαίο να εφαρμοσθούν αριθμητικές μέθοδοι, με σκοπό να καθοριστούν οι χαρακτηριστικές ιδιότητες του βρόχου υστέρησης ενός υλικού.

Ο μικρομαγνητισμός είναι μια συνεχής θεωρία της μαγνητικής δομής των μαγνητικών υλικών, όπου το εξέχον χαρακτηριστικό είναι η ένταξη της μακροσκοπικής μαγνήτισης $M(x)$ ως συστατικό της ελεύθερης ενέργειας. Σε στατικές περιπτώσεις, όπως αυτή που μελετάται στην παρούσα εργασία, το $M(x)$ προσδιορίζεται με ελαχιστοποίηση της ολικής ενέργειας του υλικού.

Θεωρήθηκε μια διάταξη $M \times N$ κελιών, όπου κάθε κελί αναπαριστά ένα ατομικό δίπολο. Μια τέτοια διάταξη προσεγγίζει επαρκώς τη συμπεριφορά μαγνητικών περιοχών. Η συνολική ενέργεια που προκύπτει από την τοπολογία της μαγνήτισης M , είναι το άθροισμα τριών συνιστωσών: ενέργεια ανισοτροπίας, ενέργεια εξωτερικού πεδίου και ενέργεια μέσου πεδίου, ή αλλιώς, ενέργεια απομαγνήτισης.

Έχει αναπτυχθεί ένας υπολογιστικός κώδικας, ο οποίος, ελαχιστοποιώντας κάθε φορά την ολική ενέργεια του συστήματος, προβλέπει τη μαγνητική του διαμόρφωση. Εκτός από την κατάλληλη μορφή της ολικής ενέργειας, η οποία αναφέρθηκε παραπάνω, είναι σημαντικό να εισαχθούν και συνοριακές συνθήκες για να εξασφαλιστεί η σωστή μορφή των ενεργειακών όρων στα όρια της επιφάνειας του υλικού. Ως δεδομένα εισάγονται κάποιες ιδιότητες του υλικού, όπως η μαγνήτιση κορεσμού, η σταθερά ανισοτροπίας, το μέτρο του διανύσματος της ολικής μαγνήτισης και το εφαρμοζόμενο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

Έγιναν υπολογισμοί της ολικής μαγνήτισης για τιμές του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου οι οποίες κυμαίνονται μεταξύ -3 και 3 kA/m. Η τοπολογία της ολικής μαγνήτισης που προέκυψε είναι ο χαρακτηριστικός βρόχος υστέρησης του υλικού.

Όσον αφορά τη συνεισφορά του κάθε όρου της ενέργειας στην ολική ενέργεια, έγιναν οι εξής παρατηρήσεις. Οι τοπικοί όροι ενέργειας, δηλαδή η ενέργεια ανισοτροπίας και η ενέργεια εξωτερικού πεδίου, αφορούν μόνο τα γειτονικά δίπολα και είναι εύκολα υπολογίσιμοι. Σε αντίθεση, ο όρος απομαγνήτισης του υλικού αποτελεί έναν μη τοπικό όρο ενέργειας. Συνεπώς, απαιτείται εκτενέστερη μελέτη και κατάλληλες συνοριακές

συνθήκες ώστε να υπολογιστεί πλήρως η συνεισφορά του, τόσο σε ολόκληρο τον όγκο του υλικού, όσο και στις οριακές επιφάνειες.

Στη συνέχεια, η διαδικασία υπολογισμού επαναλήφθηκε, για διαφορετικές τιμές της σταθεράς ανισοτροπίας του υλικού, με σκοπό να ελεγχθεί είτε, πως η αλλαγή ανισοτροπίας σε ένα υλικό, επηρεάζει το βρόχο υστέρησης, είτε τις διαφορές των βρόχων υστέρησης υλικών με διαφορετική ανισοτροπία.

Τα συμπεράσματα που προέκυψαν αποδεικνύουν ότι με αύξηση της ανισοτροπικής σταθεράς, ο βρόχος υστέρησης παρουσιάζει ολοένα αυξανόμενη κλίση σε σχέση με τον οριζόντιο άξονα μαγνήτισης του υλικού. Μόνο από υλικά όπως ο προσανατολισμένος χάλυβας, με μικρή ανισοτροπική σταθερά, παρουσιάζει βρόχο υστέρησης συμμετρικό ως προς τον άξονα της μαγνήτισης. Τέλος, η αλλαγή της ανισοτροπίας, δεν επηρεάζει το συνεκτικό πεδίο, ούτε την μαγνήτιση κορεσμού του υλικού.

Λέξεις – κλειδιά : Μικρομαγνητισμός, προσομοίωση, βρόχος υστέρησης, μαγνήτιση, σταθερά ανισοτροπίας

Abstract

This thesis presents a simulation method of the total magnetization of a material as a function of the applied external field, based on the theory of micromagnetism.

The interaction between magnetic properties and microstructure, in general, is complex and cannot be treated explicitly by the theory of micromagnetism. Instead, numerical methods have to be applied in order to determine the characteristic properties of hysteresis loop of a material.

Micromagnetism is a continuum theory of magnetic structure in magnetic materials, whose salient feature is the inclusion of macroscopic magnetization $M(x)$ as one of the arguments of the free energy. In static situations, such as that contemplated in the present study, the $M(x)$ is determined by minimization of the total energy of the material.

It was considered an arrangement of $M \times N$ cells, where each cell represents an atomic dipole. Such an arrangement sufficiently approximates the behavior of a magnetic region. The total energy derived from the topology of the magnetization M , is the sum of three components: anisotropy energy, external field energy and mean field energy, or otherwise, demagnetization energy.

A computer code has been developed, minimizing every time the total energy of the system, in order to provide the magnetic configuration. Besides the suitable form of the total energy, mentioned above, it is important to introduce boundary conditions, to ensure the correct form of energy, at the limits of the surface of the material. The imported data are some material properties such as saturation magnetization, anisotropy constant, amplitude of the total vector of magnetization and the applied external magnetic field.

There were made calculations for the values of the total magnetization, for the external magnetic field ranging between -3 and 3 Tesla. The topology of the total magnetization which revealed was the characteristic hysteresis loop of the material.

Regarding to the contribution of each energy term, local energy terms, i.e. anisotropy energy, and external field energy, concern only neighboring dipoles and are easily calculated, in such a computing code. In the other hand, demagnetization energy is a non – local energy term. Therefore, it is required an extensive study and appropriate boundary conditions in order to fully assess the contribution, both in the whole volume of material, and in the boundary surfaces.

Then, the calculation procedure was repeated for different values of the anisotropy constant of the material, in order to check whether, how the change of anisotropy in a material affects the hysteresis loop, or the differences in hysteresis loop of materials which have different anisotropy.

The conclusions obtained prove that increasing the anisotropic constant, the hysteresis loop presents increasing slope relative to the horizontal axis of magnetization of the material. Only materials, such as oriented steel, which anisotropy constant is relatively small, present hysteresis loop symmetrical to the axis of magnetization. Finally, the change of anisotropy does not affect the coercivity or the saturation magnetization of the material.

Keywords: micromagnetism, modeling, hysteresis loop, magnetization, anisotropy constant

Πίνακας περιεχομένων

Ευχαριστίες.....	1
Περίληψη.....	2
Abstract	4
Εισαγωγή στο θεωρητικό υπόβαθρο	8
1. Τα Σιδηρομαγνητικά Υλικά	8
1.1. Ιδιότητες των Σιδηρομαγνητικών υλικών	8
1.2. Βασικές παράμετροι των σιδηρομαγνητικών υλικών.....	9
2. Μαγνητικές περιοχές.....	11
2.1. Ατομικά μαγνητικά δίπολα.....	11
2.2. Θεωρία μαγνητικών περιοχών κατά Weiss	12
2.3. Εξάρτηση μαγνητικού κορεσμού από τη θερμοκρασία.....	13
2.5. Ενεργειακή κατανομή ηλεκτρονίων στα άτομα	17
2.6. Αλληλεπίδραση ανταλλαγής	20
3. Μαγνητικά Τοιχώματα	24
3.1. Μαγνητικά Τοιχώματα 180^0 και μη 180^0	25
3.2. Κίνηση μαγνητικών τοιχωμάτων.....	26
4. Ενεργειακή θεώρηση.....	28
4.1. Τοπικοί και μη τοπικοί όροι ενέργειας.....	28
4.2. Ενέργεια ανταλλαγής.....	29
4.3. Ενέργεια ανισοτροπίας	31
4.4. Ενέργεια εξωτερικού πεδίου (Zeeman).....	34
4.5. Ενέργεια ελεύθερου πεδίου	35
4.6. Μαγνητοελαστικές αλληλεπιδράσεις και μαγνητοσυστολή.....	39
5. Βρόχος υστέρησης.....	41
5.1. Μαγνητική Υστέρηση	41
5.2. Μαγνήτιση κορεσμού	43
5.3. Συνεκτικό πεδίο	43
6. Θόρυβος Barkhausen.....	43
7. Αριθμητικές Μέθοδοι Υπολογισμού	45

8. Γλώσσα Προγραμματισμού MATLAB.....	46
Μέθοδος Προσομοίωσης.....	48
1. Δομή του υλικού.....	48
2. Υπολογισμός ολικής ενέργειας	48
3. Συνοριακές συνθήκες	53
4. Περιγραφή υπολογιστικού κώδικα.....	53
Αποτελέσματα και Συζήτηση	55
Συμπεράσματα	64
Βιβλιογραφία	66

Εισαγωγή στο θεωρητικό υπόβαθρο

1. Τα Σιδηρομαγνητικά Υλικά

Ορισμένα υλικά, όπως ο σίδηρος, το νικέλιο και το κοβάλτιο, υπό την επίδραση ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου αποκτούν μεγάλη μαγνήτιση, μέρος της οποίας διατηρούν σαν μόνιμη μαγνήτιση και μετά την απομάκρυνση του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται σιδηρομαγνητισμός. Τα υλικά με τη συμπεριφορά αυτή, σιδηρομαγνητικά, είναι πολύ μεγάλης σημασίας για διάφορες τεχνολογικές εφαρμογές, όπως ανάγνωση και εγγραφή σε μαγνητοοπτικά μέσα (HDs, CDs), όργανα μέτρησης, αισθητήρες, σε διακόπτες κυκλωμάτων σε όργανα ελέγχου κλπ.

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μια αναφορά των βασικών παραμέτρων που αφορούν τα σιδηρομαγνητικά υλικά καθώς και οι ιδιότητες του και τα φαινόμενα που τα διέπουν. Τα φαινόμενα αυτά, οφείλονται σε μαγνητικές περιοχές και στα μαγνητικά τοιχώματα που χωρίζουν τις μαγνητικές περιοχές, τα οποία θα παρουσιασθούν αναλυτικά σε αυτό το κεφάλαιο.

Στη συνέχεια παρουσιάζεται η ενεργειακή θεώρηση του φαινομένου του σιδηρομαγνητισμού. Παρουσιάζονται αναλυτικά όλοι οι όροι της ενέργειας που συνεισφέρουν στην ολική ενέργεια ενός σιδηρομαγνητικού υλικού, στο πλαίσιο της θεωρίας μικροδομής που ισχύουν για τα σιδηρομαγνητικά υλικά. Επιπλέον, γίνεται αναφορά στο βρόχο υστέρησης, του διαγράμματος αναπαράστασης των μαγνητικών ιδιοτήτων και στο θόρυβο Barkhausen.

Στο τέλος του κεφαλαίου εισάγονται οι μέθοδοι αριθμητικού υπολογισμού που χρησιμοποιούνται στην παρούσα εργασία, καθώς και το αντίστοιχο υπολογιστικό πρόγραμμα.

1.1. Ιδιότητες των Σιδηρομαγνητικών υλικών

Είναι γνωστό, τα σιδηρομαγνητικά υλικά έλκονται έντονα από τους μαγνήτες. Όταν μια ράβδος, από σιδηρομαγνητική ουσία, βρεθεί μέσα σε μαγνητικό πεδίο, τότε ευθυγραμμίζεται αμέσως κατά μήκος της κατεύθυνσης του μαγνητικού πεδίου. Επιπλέον, οι δυναμικές γραμμές του μαγνητικού πεδίου, γίνονται εξαιρετικά πυκνές στην περιοχή του σιδηρομαγνητικού υλικού.

Στα σιδηρομαγνητικά στοιχεία, όταν εφαρμοσθεί εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, παρουσιάζεται έντονη μαγνήτιση, με κατεύθυνση ίδια με αυτή της κατεύθυνσης του μαγνητικού πεδίου. Τα υλικά αυτά, τείνουν να παραμένουν μαγνητισμένα σε κάποιο βαθμό, αφού σε αυτά νωρίτερα, έχει υποβληθεί ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο [1]. Αυτή η τάση να "θυμούνται τη μαγνητική ιστορία τους" ονομάζεται υστέρηση. Το ποσοστό της μαγνήτισης κορεσμού το οποίο διατηρείται, όταν αφαιρείται το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, ονομάζεται παραμένουσα μαγνήτιση του υλικού, και είναι ένας σημαντικός παράγοντας στους μόνιμους μαγνήτες.

1.2. Βασικές παράμετροι των σιδηρομαγνητικών υλικών

Προτού γίνει αναφορά στις βασικές παραμέτρους οι οποίες αφορούν τα σιδηρομαγνητικά υλικά, θα ήταν χρήσιμο να εισαγάγουμε τις έννοιες του μαγνητικού πεδίου και της μαγνητικής επαγωγής.

Μία από τις θεμελιώδεις έννοιες, που διέπουν την θεωρία του μαγνητισμού, είναι το **μαγνητικό πεδίο H** . Όπως και το ηλεκτρικό πεδίο, έτσι και το μαγνητικό πεδίο είναι ένα διανυσματικό πεδίο δηλαδή μια διανυσματική ποσότητα που σχετίζεται με κάθε σημείο του χώρου.

Το μαγνητικό πεδίο δημιουργείται από ένα κινούμενο φορτίο ή από ένα ηλεκτρικό ρεύμα. Επίσης, μαγνητικό πεδίο παράγεται από πηγές, χωρίς την προφανή παρουσία ηλεκτρικών ρευμάτων, όπως από μόνιμους μαγνήτες. Στην περίπτωση αυτή, δεν υπάρχουν συμβατικά ηλεκτρικά ρεύματα, αλλά οι τροχιακές και περιστροφικές κινήσεις των ηλεκτρονίων, καθώς και η ιδιοπεριστροφή αυτών (spin), προκαλούν την μαγνήτιση του υλικού και την δημιουργία μαγνητικού πεδίου στο χώρο γύρω από αυτό.

Η μονάδα μέτρησης της έντασης του μαγνητικού πεδίου είναι το Ampere/m. Ως Ampere/m ορίζεται η ένταση του μαγνητικού πεδίου που παράγεται από ένα μακρύ σωληνοειδές που αποτελείται από n σπείρες ανά μέτρο και που διαρρέεται από ρεύμα έντασης $1/n$ Ampere.

Όταν ένα μαγνητικό πεδίο παράγεται σε ένα μέσο από ένα ηλεκτρικό ρεύμα, η απόκριση του μέσου είναι η **μαγνητική επαγωγή B** . Η μαγνητική επαγωγή, που είναι γνωστή και ως **πυκνότητα μαγνητικής ροής** (flux density), καθορίζει τον τρόπο με τον οποίο ένα μέσο αντιδρά όταν βρίσκεται σε χώρο που καταλαμβάνεται από μαγνητικό πεδίο.

Καθώς η μαγνητική ροή είναι ιδιότητα που εξαρτάται από το μέσο, η μαγνητική επαγωγή είναι και αυτή ιδιότητα του μέσου, σε αντίθεση με την ένταση του μαγνητικού πεδίου, που είναι ιδιότητα του χώρου.

Οι πιο βασικές παράμετροι που αφορούν και χαρακτηρίζουν τα σιδηρομαγνητικά υλικά είναι οι εξής:

- **Ένταση μαγνήτισης M** (Μαγνητική ροπή ανά μονάδα όγκου)

Στην ηλεκτρομαγνητική θεωρία, η μαγνήτιση, ή μαγνητική πόλωση αποτελεί το διανυσματικό πεδίο που εκφράζει την πυκνότητα των μόνιμων ή επαγόμενων μαγνητικών διπολικών ροπών σε ένα μαγνητικό υλικό. Η προέλευση των μαγνητικών ροπών, οι οποίες είναι υπεύθυνες για τη μαγνήτιση μπορεί να είναι είτε μικροσκοπικά ηλεκτρικά ρεύματα που προκύπτουν από την κίνηση των ηλεκτρονίων των ατόμων, είτε το spin των ηλεκτρονίων ή των πυρήνων των ατόμων.

Η μαγνήτιση είναι αποτέλεσμα της επίδρασης ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου σε ένα υλικό, σε συνδυασμό με τυχόν μαγνητικές διπολικές ροπές που μπορεί να υφίστανται μέσα στο ίδιο το υλικό, όπως στην περίπτωση των σιδηρομαγνητικών υλικών. Η μαγνήτιση του υλικού δεν είναι πάντοτε ομοιογενής, αλλά μάλλον ποικίλλει μεταξύ των διαφόρων σημείων. Η ένταση και η κατεύθυνση της μαγνήτισης περιγράφουν τον τρόπο με τον οποίο ένα υλικό ανταποκρίνεται σε ένα εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο, καθώς και τον τρόπο με τον οποίο το υλικό αλληλεπιδρά με το μαγνητικό πεδίο, και είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό των δυνάμεων που προκύπτουν από αυτές τις αλληλεπιδράσεις. Η μαγνήτιση ορίζεται ως η ποσότητα της μαγνητικής ροπής ανά μονάδα όγκου.

- **Η Μαγνητική διαπερατότητα (μ)**

Η μαγνητική διαπερατότητα (magnetic permeability) ορίζεται ως το μέτρο της ικανότητας ενός υλικού να υποστηρίξει το σχηματισμό ενός μαγνητικού πεδίου εντός του ίδιου. Διαφορετικά, αποτελεί τον βαθμό της μαγνήτισης που αποκτά το υλικό συγκριτικά με το εφαρμοζόμενο εξωτερικό πεδίο. Υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\mu = \frac{B}{H} \quad (1)$$

Η πυκνότητα μαγνητικής ροής, B , είναι ένα μέτρο του μαγνητικού πεδίου εντός του υλικού και υπολογίζεται ως η συγκέντρωση των δυναμικών μαγνητικών γραμμών.

Αξίζει να σημειωθεί πως στο κενό, η μαγνητική διαπερατότητα είναι ίση με την μονάδα. Η πυκνότητα μαγνητικής ροής ταυτίζεται με το εφαρμοζόμενο πεδίο, καθώς δεν υπάρχει υλικό ώστε να αλλάξει το πεδίο αυτό. Στα σιδηρομαγνητικά υλικά, η μαγνητική διαπερατότητα είναι μεγαλύτερη από αυτή του κενού, που σημαίνει ότι το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο μπορεί να προκαλέσει μεγαλύτερη αλλαγή στην μαγνητική ροή μέσα στο υλικό.

Στην πράξη συναντάται ο όρος σχετική μαγνητική διαπερατότητα, που χρησιμοποιείται κυρίως στο S.I. σύστημα και ορίζεται ως εξής:

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} \quad (2)$$

- **Η Μαγνητική επιδεκτικότητα (χ_m)**

Η μαγνητική επιδεκτικότητα (susceptibility) είναι μια αδιάστατη σταθερά αναλογίας η οποία υποδεικνύει το βαθμό της μαγνήτισης ενός υλικού σε σχέση με το εφαρμοζόμενο εξωτερικό πεδίο. Υπολογίζεται από τη σχέση

$$\chi_m = \frac{M}{H} \quad (3)$$

Η επιδεκτικότητα των σιδηρομαγνητικών υλικών μειώνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας με πολύπλοκο τρόπο. Όλοι οι σιδηρομαγνήτες έχουν μια μέγιστη θερμοκρασία όπου οι σιδηρομαγνητικές ιδιότητες εξαφανίζονται ως αποτέλεσμα της θερμικής διέγερσης. Η θερμοκρασία αυτή ονομάζεται θερμοκρασία Curie ή σημείο Curie [2]. Στη θερμοκρασία αυτή, ένα σιδηρομαγνητικό υλικό αρχίζει να συμπεριφέρεται ως ένα παραμαγνητικό υλικό.

Σε θερμοκρασίες κάτω από το σημείο Curie, οι μαγνητικές ροπές των σιδηρομαγνητικών υλικών ευθυγραμμίζονται μερικώς σε σχέση με τις μαγνητικές περιοχές. Κατά την αύξηση της θερμοκρασίας, σε τιμές που είναι μικρότερες από τη θερμοκρασία Curie, ξεκινάει μια θερμική διέγερση η οποία καταστρέφει αυτήν την ευθυγράμμιση των μαγνητικών ροπών. Η καθαρή μαγνήτιση μηδενίζεται από το σημείο Curie και πάνω.

Η σχετική μαγνητική διαπερατότητα συνδέεται στενά με την μαγνητική επιδεκτικότητα και η ακόλουθη σχέση ισχύει σε κάθε περίπτωση:

$$\mu_r = \chi + 1 \quad (4)$$

2. Μαγνητικές περιοχές

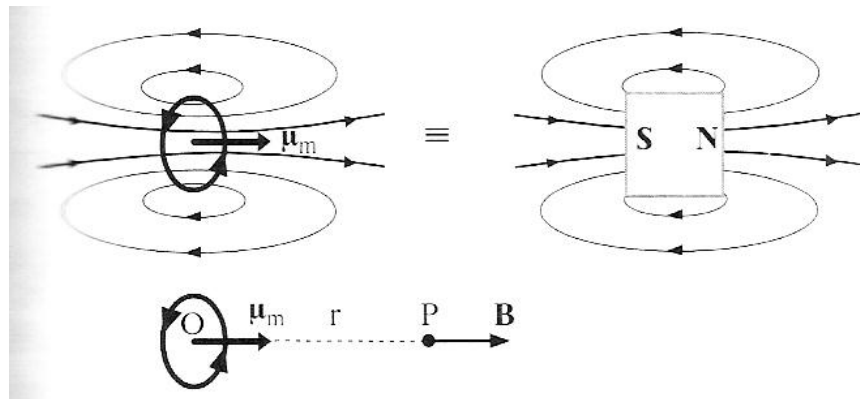
Μακροσκοπικά η μαγνήτιση είναι ένα φαινόμενο που οφείλεται στο εξωτερικά επιβαλλόμενο πεδίο. Η θεωρία των μαγνητικών περιοχών, αντίστοιχα, εξηγεί πώς μεταβάλλεται η μαγνήτιση μικροσκοπικά μέσα στο μαγνητικό υλικό.

2.1. Ατομικά μαγνητικά δίπολα

Όπως η ύλη αποτελείται από άτομα και μόρια, με ανάλογο τρόπο τα μαγνητικά υλικά αποτελούνται από στοιχειώδεις μαγνήτες. Η υπόθεση των στοιχειωδών μαγνητών [3] εξηγεί ικανοποιητικά δύο βασικά πειραματικά δεδομένα:

- την αδυναμία απομόνωσης μαγνητικών νότιων και βόρειων πόλων

- και το φαινόμενο μαγνητικού κορεσμού, όπου όλοι οι στοιχειώδεις μαγνήτες προσανατολίζονται προς την ίδια κατεύθυνση.



Εικόνα 1. Ένα μαγνητικό δίπολο δημιουργεί ένα μαγνητικό πεδίο, ακριβώς όπως και ένας ραβδόμορφος μαγνήτης.

Αρχικά αναπτύχθηκε μια θεωρία παραμαγνητισμού από τον Lavengin [4] χρησιμοποιώντας τη μέθοδο στατιστικής θερμοδυναμικής του Boltzmann. Αποδείχθηκε ότι ανεξάρτητοι μοριακοί μαγνήτες, σε θερμοκρασία δωματίου, μπορούν να οδηγήσουν σε ασθενή μαγνητικά φαινόμενα, οδηγώντας στο συμπέρασμα ότι φαινόμενα ισχυρού μαγνητισμού μπορούν να οφείλονται σε κάποια αλληλεπίδραση μεταξύ στοιχειωδών μαγνητών.

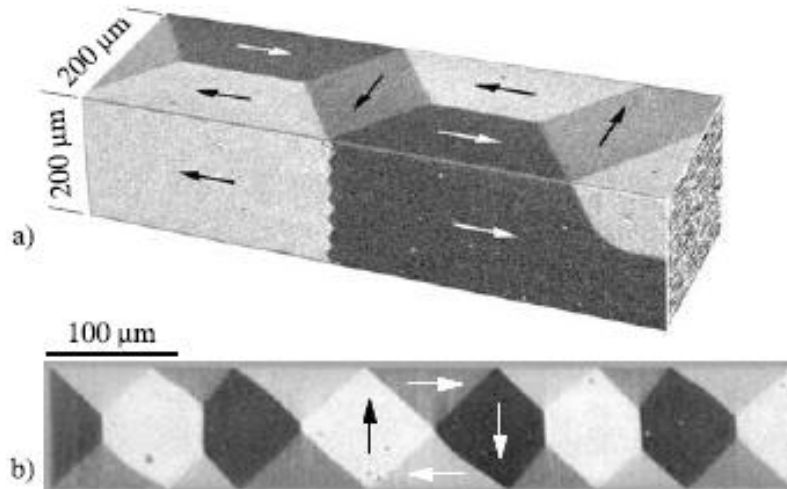
2.2. Θεωρία μαγνητικών περιοχών κατά Weiss

Με βάση τα παραπάνω, διατυπώθηκε η θεωρία μαγνητικών περιοχών κατά Weiss [5, 6]. Σύμφωνα με τη θεωρία αυτή, οι σιδηρομαγνήτες έχουν μαγνητικές περιοχές. Σε κάθε μία από τις περιοχές αυτές, τα μαγνητικά δίπολα (πλήθους 10^{12} ως 10^{15}) είναι προσανατολισμένα παράλληλα, έτσι ώστε η μαγνήτιση μέσα σ' αυτήν να φτάνει μέχρι τον κορεσμό. Ωστόσο, η διεύθυνση προσανατολισμού διαφέρει από περιοχή σε περιοχή με τυχαίο τρόπο, αν και τα δίπολα επιλέγουν να προσανατολίζονται σε διευθύνσεις κύριων κρυσταλλογραφικών αξόνων, όταν δεν υπάρχει εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

Τα άμεσα συμπεράσματα αυτής της θεωρίας είναι:

- Τα ατομικά μαγνητικά δίπολα υπάρχουν και δεν δημιουργούνται από το πεδίο,
- Τα δίπολα είναι μικροσκοπικώς παραλληλισμένα ακόμα και όταν το υλικό δεν έχει μαγνήτιση,
- Οι μαγνητικές περιοχές είναι αυτές που έχουν τυχαίες διευθύνσεις, όταν το υλικό δεν έχει μαγνήτιση,
- Κατά τη διαδικασία της μαγνήτισης επαναπροσανατολίζονται οι μαγνητικές περιοχές, έτσι ώστε είτε περισσότερες μαγνητικές περιοχές προσανατολίζονται

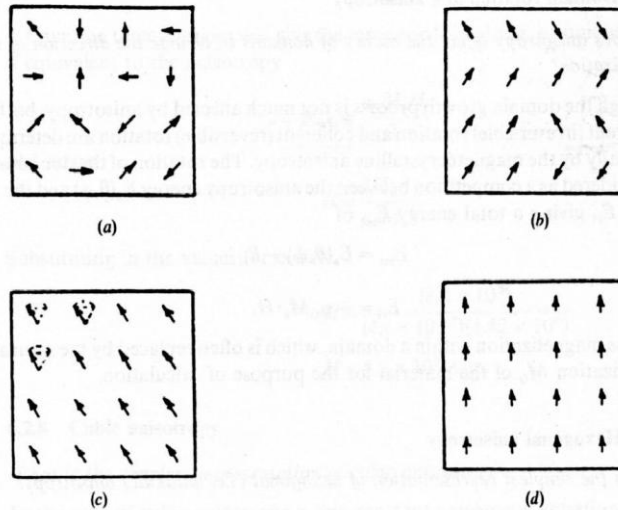
προς το μαγνητικό πεδίο, είτε ο χώρος των μαγνητικών περιοχών που είναι προσανατολισμένες προς το πεδίο να είναι μεγαλύτερος από τον χώρο των περιοχών που αντιτίθενται στο πεδίο.



Εικόνα 2. Μαγνητικές περιοχές που παρατηρήθηκαν με μαγνητο-οπτικές μεθόδους σε ομοιογενή μαγνητικά δείγματα. α) Δείγμα σιδήρου, όπου με βοήθεια υπολογιστή έχει προσομοιωθεί μια προοπτική άποψη του δείγματος. β) Πολυκρυσταλλικό λεπτό υμένιο (πάχους 130nm) με ασθενή εγκάρσια ανισοτροπία.

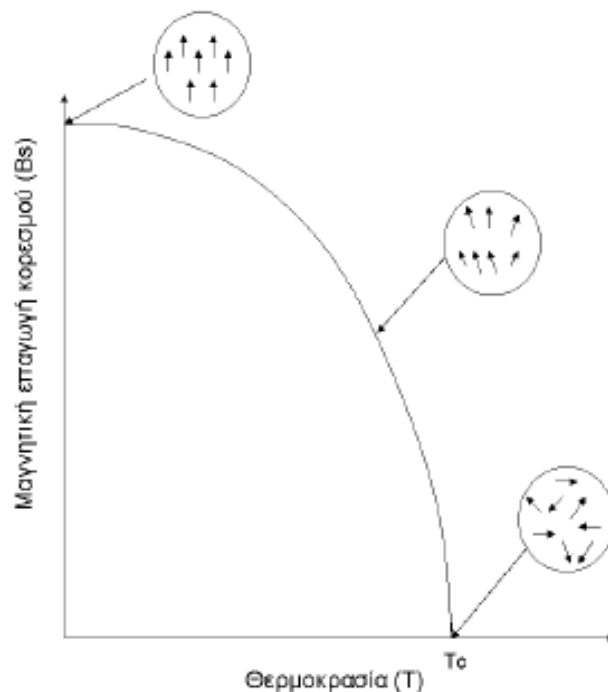
2.3. Εξάρτηση μαγνητικού κορεσμού από τη θερμοκρασία

Η διάσημη θεωρία του Weiss κατόρθωσε να αποκομίσει το γενικό σχήμα της εξάρτησης του μαγνητικού κορεσμού από τη θερμοκρασία, προσαρμόζοντας την ισχύ της αλληλεπίδρασης έτσι ώστε, πειραματικώς, να παρατηρείται η θερμοκρασία Curie. Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, η εσωτερική μαγνήτιση εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Στους 0 K είναι ίση με τη μαγνήτιση κορεσμού και στο σημείο Curie ίση με μηδέν.



Εικόνα 3. Προσανατολισμός ξεχωριστών ατομικών διπόλων μέσα σε μία περιοχή σε διάφορες θερμοκρασίες: (α) Πάνω από τη θερμοκρασία Curie ο προσανατολισμός είναι τυχαίος, (β) Κάτω από τη θερμοκρασία Curie, (γ) Σε χαμηλές θερμοκρασίες στις οποίες τα μαγνητικά δίπολα περιστρέφονται λιγότερο ή περισσότερο περί τον άξονα της διεύθυνσης του πεδίου και (δ) Τέλεια προσανατολισμός στους 0 K όπου δεν υπάρχει θερμική ενέργεια για κλονισμό.

Σε θερμοκρασίες μεγαλύτερες των 0 K το κάθε ατομικό δίπολο έχει θερμική ενέργεια, η οποία προκαλεί κωνική περιστροφή του διανύσματος της ροπής γύρω από τον άξονα του πεδίου, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3. Ο κλονισμός αυτός γίνεται μεγαλύτερος καθώς αυξάνει η θερμοκρασία και είναι η αιτία που υποχρεώνει την εσωτερική μαγνήτιση να είναι μικρότερη από τη μαγνήτιση κορεσμού [7]. Τελικά, όταν όλες οι μαγνητικές ροπές μέσα στη μαγνητική περιοχή προσανατολιστούν πλήρως, εξαιτίας ενός πολύ υψηλού μαγνητικού πεδίου, η μαγνήτιση γίνεται μέγιστη. Αξίζει να σημειωθεί ότι η θερμοκρασία Curie ενός υλικού μπορεί να τροποποιηθεί με κατάλληλη κραματοποίηση [8, 9]. Ο όρος κραματοποίηση αποτελεί τη διαδικασία πρόσδοσης υψηλής ενέργειας σε ένα μίγμα από καθαρές μεταλλικές σκόνες, για την κατασκευή κράματος με διαφορετικές φυσικές και μηχανικές ιδιότητες, και κατ' επέκταση, διαφορετικές θερμοκρασίες Curie.



Εικόνα 4. Μεταβολή της μαγνητικής επαγωγής κορεσμού σιδηρομαγνητικού υλικού συναρτήσει της θερμοκρασίας. Η σιδηρομαγνητική συμπεριφορά εξαφανίζεται πάνω από τη θερμοκρασία Curie (T_C). Οι στοιχειώδεις ατομικές μαγνητικές ροπές σημειώνονται με βέλη.

2.4. Θεωρία μέσου πεδίου κατά Weiss

Για να μπορέσει ο Weiss να εξηγήσει την τάξη των μαγνητικών διπόλων μέσα στις μαγνητικές περιοχές, εφάρμοσε τη στατιστική θερμοδυναμική θεωρία των Boltzmann και Langevin στα μαγνητικά υλικά. Ο Weiss χρησιμοποίησε το μοντέλο του Langevin, προσθέτοντας έναν ακόμα όρο, το λεγόμενο μέσο πεδίο Weiss [10].

Το μέσο πεδίο Weiss είναι μία ατομική αλληλεπίδραση, η οποία ωθεί τα γειτονικά ατομικά μαγνητικά δίπολα να προσανατολιστούν παράλληλα, γιατί μ' αυτόν τον τρόπο ελαχιστοποιούν την ενέργειά τους [11].

Στην αρχική θεωρία του Weiss, το μέσο πεδίο είναι ανάλογο της μαγνήτισης M , έτσι ώστε να ισχύει:

$$H_e = a \cdot M \quad (5)$$

όπου a είναι η σταθερά του μέσου πεδίου.

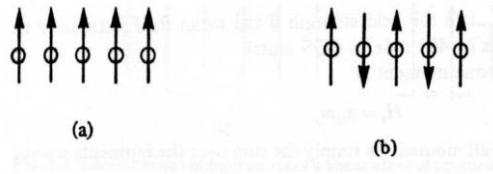
Η σχέση αυτή είναι ισοδύναμη με την υπόθεση ότι κάθε ατομική διπολική ροπή αλληλεπιδρά με ακριβώς τον ίδιο τρόπο με κάθε άλλη ατομική διπολική ροπή μέσα στο στερεό. Η υπόθεση αυτή αποδείχθηκε ότι είναι βάσιμη στον παραμαγνητισμό. Ο λόγος είναι ότι εξαιτίας της ομογενούς κατανομής των διευθύνσεων των ατομικών διπόλων, η

τοπική τιμή της μαγνήτισης που λαμβάνεται από έναν μικρό χώρο του υλικού, ο οποίος περικυκλώνει ένα ατομικό μαγνητικό δίπολο, είναι ίσος με την ολική μαγνήτιση.

Αντίθετα, στον σιδηρομαγνητισμό, η μαγνήτιση είναι τοπικά ανομοιογενής σε μία κλίμακα μεγαλύτερη από την κλίμακα των μαγνητικών περιοχών, εξαιτίας της μεταβολής της μαγνήτισης από περιοχή σε περιοχή. Για τον λόγο αυτό η θεωρία του Weiss για το μέσο πεδίο εφαρμόστηκε μόνο στον εσωτερικό χώρο κάθε μαγνητικής περιοχής, θεωρώντας ότι η αλληλεπίδραση των ατομικών διπόλων εξασθενεί με την απόσταση και κατά συνέπεια η αλληλεπίδραση αυτή δεν μπορεί να επεκταθεί πέρα από μία μαγνητική περιοχή.

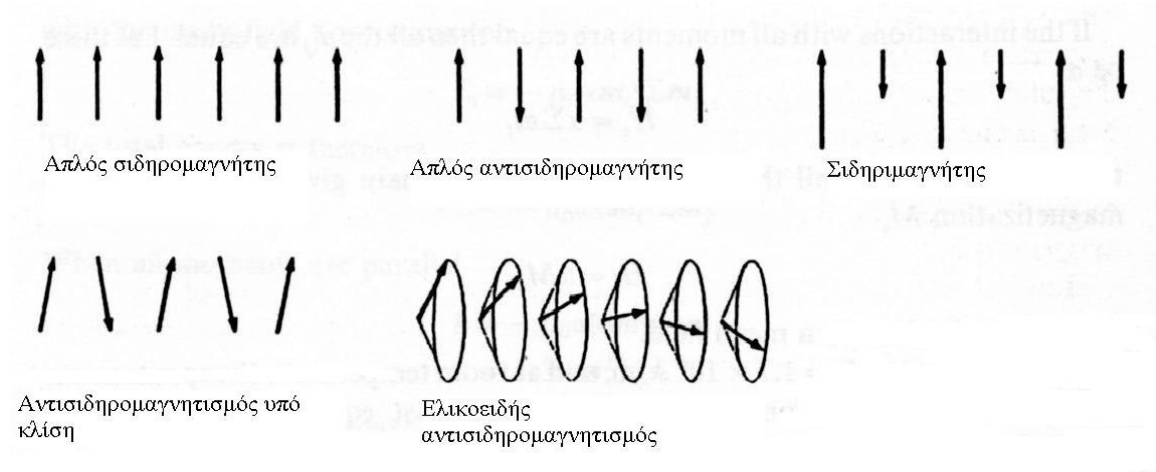
Γενικά, η θεωρία μέσου πεδίου του Weiss εκλαμβάνεται ως η ορθότερη προσέγγιση της πραγματικότητας για το τι συμβαίνει μέσα σε μία μαγνητική περιοχή, αφού σε κάθε μαγνητική περιοχή η μαγνήτιση είναι ομογενής και έχει μία γνωστή τιμή M_s . Το πεδίο αλληλεπιδράσεων, στο οποίο οφείλεται ο προσανατολισμός των διπόλων μέσα στις μαγνητικές περιοχές, μπορεί να εκφραστεί όπως προαναφέραμε ως $H_e = \alpha M$, όπου M_s είναι η εσωτερική μαγνήτιση μέσα στην μαγνητική περιοχή και η οποία ισούται με τη μαγνήτιση κορεσμού στους 0 K. Ωστόσο η τιμή του μέσου πεδίου μειώνεται καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται και μηδενίζεται στη θερμοκρασία Curie.

Νέα μοντέλα, όπως το μοντέλο Ising [12] εφαρμοσμένα στους σιδηρομαγνήτες, έχουν βασισθεί σε αλληλοεπιδρώντα πεδία μόνο ανάμεσα στα πιο γειτονικά άτομα. Τα μοντέλα αυτά εξηγούν πως μπαίνουν σε τάξη οι ατομικές διπολικές ροπές μέσα σε μία μαγνητική περιοχή, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 5.



Εικόνα 5. (α) Μαγνητικές διπολικές ροπές σε τάξη όταν $\alpha > 0$ που οδηγούν στον σιδηρομαγνητισμό, (β) Το ίδιο με $\alpha < 0$ που οδηγούν στον αντισιδηρομαγνητισμό.

Σε μια μαγνητική περιοχή, όπου η σταθερά μέσου πεδίου είναι θετική, οι ατομικές διπολικές ροπές προσανατολίζονται παράλληλα μεταξύ τους και με το πεδίο και οδηγούν στο φαινόμενο του σιδηρομαγνητισμού. Στην περίπτωση που η σταθερά α του πεδίου είναι αρνητική, οι διπολικές ροπές προσανατολίζονται αντιπαράλληλα και οδηγούν στο φαινόμενο του αντισιδηρομαγνητισμού. Στο σημείο αυτό πρέπει να σημειώσουμε ότι μπορούν να υπάρξουν πολλές μορφές προσανατολισμού ατομικών μαγνητικών ροπών, εξαρτώμενες από την παράμετρο αλληλεπίδρασης α . Μερικές από τις μορφές αυτές φαίνονται στην Εικόνα 6.



Εικόνα 6. Παραδείγματα διαφόρων τύπων μαγνητικής τάξης γειτονικών ροπών. Φαίνονται ο σιδηρομαγνητισμός, ο απλός αντισιδηρομαγνητισμός, ο σιδηρομαγνητισμός και ο ελικοειδής αντισιδηρομαγνητισμός.

2.5. Ενεργειακή κατανομή ηλεκτρονίων στα άτομα

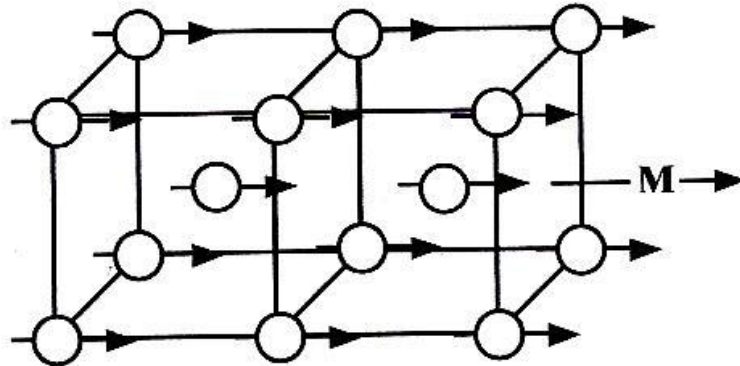
Όπως είναι γνωστό από την ενεργειακή κατανομή των ηλεκτρονίων στα άτομα, σε κάθε τροχιακό συγκεκριμένου ενεργειακού επιπέδου υπάρχουν το πολύ δύο ηλεκτρόνια με αντίθετους κβαντικούς αριθμούς spin (απαγορευτική αρχή του Pauli), δηλαδή αν δύο ηλεκτρόνια βρίσκονται στην ίδια ενεργειακή στάθμη έχουν υποχρεωτικά αντίθετο spin. Επομένως, τα ηλεκτρόνια αυτά θα έχουν αντίθετες μαγνητικές ροπές και όταν τα τροχιακά είναι πλήρη, η συνολική μαγνητική ροπή θα είναι ίση με μηδέν.

Στην περίπτωση τώρα, που ο αριθμός των ηλεκτρονίων σε ένα άτομο είναι μονός, θα περιμέναμε, με βάση τα παραπάνω, το άτομο να έχει μαγνητική ροπή διάφορη του μηδενός, λόγω του μονήρους ασύζευκτου ηλεκτρονίου. Όμως, επειδή στα περισσότερα άτομα των στοιχείων το μονήρες ηλεκτρόνιο είναι ηλεκτρόνιο της εξωτερικής ενεργειακής στάθμης (ηλεκτρόνιο σθένους), παρατηρείται αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων σθένους των διαφορετικών ατόμων, τα οποία συνδέονται μεταξύ τους και σχηματίζουν χημικούς δεσμούς με αποτέλεσμα οι μαγνητικές ροπές τους να αλληλοεξουδετερώνονται και έτσι να μην παρουσιάζεται μαγνητική ροπή στα υλικά αυτά.

Ωστόσο, ορισμένα χημικά στοιχεία έχουν εσωτερικά ενεργειακά επίπεδα ασυμπλήρωτα. Συγκεκριμένα, τα μεταβατικά στοιχεία παρουσιάζουν μερικώς συμπληρωμένα τα 3d τροχιακά τους ενώ διαθέτουν ηλεκτρόνια και στην τέταρτη κύρια ενεργειακή στάθμη.

Σε ένα μαγνητισμένο κρύσταλλο σιδήρου, όλες οι ατομικές μαγνητικές ροπές είναι παράλληλες και έχουν την ίδια φορά (Εικ. 7). Στην περίπτωση που απεικονίζεται,

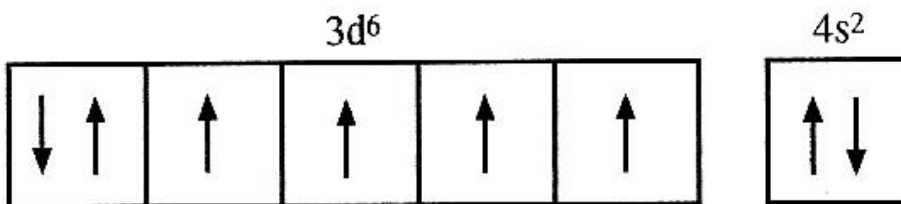
όλες οι ροπές είναι παράλληλες προς την κρυσταλλογραφική διεύθυνση [100]. Επομένως, η συνολική μαγνήτιση θα είναι σε αυτήν την διεύθυνση.



Εικόνα 7. Σε μια μαγνητισμένη περιοχή ενός σιδηρομαγνητικού υλικού, όπως ο σίδηρος, οι μαγνητικές ροπές είναι από μόνες τους παράλληλες και έχουν την ίδια φορά. Υπάρχει ένα ισχυρό διάνυμα μαγνήτισης M ακόμα και απουσία εφαρμοζόμενου πεδίου.

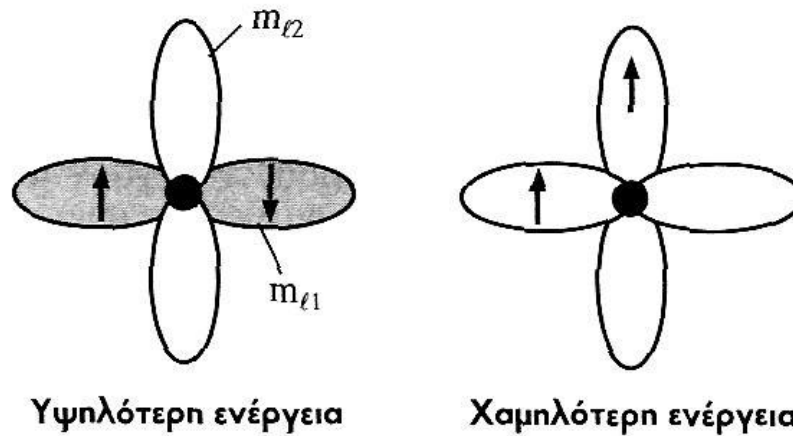
Θα μπορούσε κανείς να σκεφτεί ότι ο λόγος για τον οποίο οι μαγνητικές ροπές είναι παράλληλες είναι οι μαγνητικές δυνάμεις μεταξύ των ίδιων των ροπών. Στην πραγματικότητα όμως, δεν είναι αυτή η αιτία που προκαλεί αυτόν τον παραλληλισμό των μαγνητικών ροπών [13]. Η δυναμική ενέργεια της μαγνητικής αλληλεπίδρασης είναι μικρή, μικρότερη ακόμα και από τη θερμική ενέργεια.

Η ηλεκτρονική δομή του ατόμου του σιδήρου είναι $[Ar]3d^64s^2$. Σε ένα απομονωμένο άτομο σιδήρου, τέσσερα από τα πέντε τροχιακά της υποστοιβάδας 3d είναι μη κατειλημμένα. Λόγω του κανόνα του Hund, τα ηλεκτρόνια τείνουν να ευθυγραμμίσουν τα spin τους κατά τέτοιο τρόπο ώστε τα πέντε τροχιακά 3d να περιέχουν δύο ζευγαρωμένα και τέσσερα μονήρη ηλεκτρόνια (Εικόνα 8).



Εικόνα 8. Ένα απομονωμένο άτομο Fe έχει τέσσερα μη ζευγαρωμένα spin.

Η προέλευση του κανόνα του Hund (Εικ. 8) έγκειται στο γεγονός ότι, όταν τα spin είναι παράλληλα, όταν δηλαδή τα ηλεκτρόνια έχουν το ίδιο m_s , τότε, λόγω της αρχής του αποκλεισμού του Pauli, τα ηλεκτρόνια θα πρέπει να καταλαμβάνουν τροχιακά με διαφορετικό m_l , να έχουν δηλαδή διαφορετική κατανομή στο χώρο (το μέγεθος m_l καθορίζει τον προσανατολισμό της τροχιάς).



Εικόνα 9. Ο κανόνας του Hund για ένα άτομο με πολλά ηλεκτρόνια στηρίζεται στην αλληλεπίδραση ανταλλαγής.

Η ύπαρξη διαφορετικών τιμών m_l έχει ως αποτέλεσμα η ενέργεια μεταξύ των ηλεκτρονίων λόγω της απώσης Coulomb να είναι στην περίπτωση αυτή μικρότερη από ότι θα ήταν στην περίπτωση όπου τα ηλεκτρόνια έχουν αντίθετα spin (διαφορετικά m_s) καταλαμβάνοντας το ίδιο τροχιακό (ίδιο m_l) και επομένως την ίδια περιοχή του χώρου.

Μολονότι η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των ηλεκτρονίων δεν έχει σχέση με τις μαγνητικές δυνάμεις, εξαρτάται όμως από τον προσανατολισμό των spin τους (m_s), ή από τις spin μαγνητικές ροπές τους και είναι μικρότερη όταν τα spin είναι παράλληλα.

Επομένως, δύο ηλεκτρόνια αποκτούν παράλληλα spin, όχι λόγω μιας απευθείας μαγνητικής αλληλεπίδρασης μεταξύ των spin μαγνητικών ροπών τους, αλλά λόγω της αρχής του αποκλεισμού του Pauli και της ενέργειας της ηλεκτροστατικής αλληλεπίδρασης. Τα δύο αυτά δεδομένα συγκροτούν από κοινού την αλληλεπίδραση ανταλλαγής, η οποία εξαναγκάζει δύο ηλεκτρόνια να αποκτούν m_l και m_s τέτοια ώστε να ελαχιστοποιείται η ηλεκτροστατική ενέργεια.

Επομένως, σε ένα άτομο η αλληλεπίδραση ανταλλαγής εξαναγκάζει δύο ηλεκτρόνια να αποκτούν το ίδιο m_s αλλά διαφορετικό m_l . Αυτό συμβαίνει λόγω της αρχής του αποκλεισμού του Pauli. Αυτός είναι ο λόγος για τον οποίο ένα απομονωμένο άτομο Fe έχει στην υποστοιβάδα 3d τέσσερα μη ζευγαρωμένα spin.

Στον κρύσταλλο βέβαια, τα εξωτερικά ηλεκτρόνια δεν είναι δεσμευμένα από τα άτομα Fe από τα οποία προέρχονται. Αυτό ισχύει ειδικά για τα ηλεκτρόνια 4s. Τα ηλεκτρόνια χαρακτηρίζονται πλέον από κυματοσυναρτήσεις που ανήκουν σε ολόκληρο το στερεό.

Στο κρυσταλλικό επίπεδο, για το Fe, το Co και το Ni, εξακολουθεί να ισχύει κάτι παρόμοιο με τον κανόνα του Hund. Αν δύο ηλεκτρόνια 3d αποκτήσουν παράλληλα spin και καταλάβουν διαφορετικές κυματοσυναρτήσεις (αποκτούν επομένως διαφορετικές κατανομές αρνητικού φορτίου), τότε η αμοιβαία απώση Coulomb που προκύπτει μεταξύ τους και με άλλα ηλεκτρόνια, όπως επίσης και η έλξη με τα θετικά ιόντα Fe, έχουν ως

αποτέλεσμα μια συνολική μείωση της δυναμικής ενέργειας. Η μείωση της ενέργειας οφείλεται και πάλι στην αλληλεπίδραση ανταλλαγής και είναι άμεσο αποτέλεσμα της αρχής του αποκλεισμού του Pauli και των δυνάμεων Coulomb. Άρα, η πλειοψηφία των ηλεκτρονίων 3d παραλληλίζουν τα spin τους χωρίς να χρειάζονται την εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου.

2.6. Αλληλεπίδραση ανταλλαγής

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, τα ηλεκτρονικά τροχιακά των γειτονικών ατόμων επικαλύπτονται, γεγονός που οδηγεί σε αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων. Αυτό οδηγεί στην διατομική αλληλεπίδραση ανταλλαγής, και κατ' επέκταση, η συνολική ενέργεια του κρυστάλλου εξαρτάται από το σχετικό προσανατολισμό των spin που εντοπίζεται στα γειτονικά άτομα [14]. Η αλληλεπίδραση ανταλλαγής είναι η μεγαλύτερη μαγνητική αλληλεπίδραση σε στερεά ($\approx 1\text{eV}$) και είναι υπεύθυνη για την ύπαρξη της παράλληλης, στα σιδηρομαγνητικά υλικά, ευθυγράμμισης των τροχιακών.

Η αλληλεπίδραση ανταλλαγής θα μπορούσε να προκαλείται από διάφορους μηχανισμούς, ανάλογα με το υλικό το οποίο εξετάζεται σε κάθε περίπτωση. Οι σημαντικότεροι μηχανισμοί περιγράφονται παρακάτω.

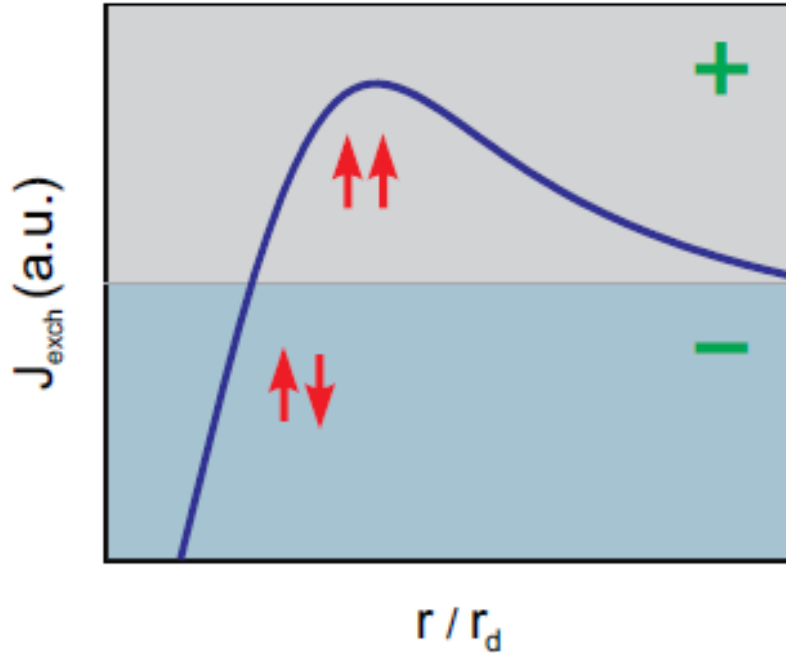
Άμεση ανταλλαγή

Ο μηχανισμός άμεσης ανταλλαγής προκύπτει από την άμεση επικάλυψη των κυματικών εξισώσεων των ηλεκτρονίων των γειτονικών ατόμων και την απαγορευτική αρχή του Pauli. Η αρχή του Pauli απαιτεί διαφορετικές ιδιότητες συμμετρίας για τις χωρικές κυματικές εξισώσεις των ηλεκτρονίων και διαφορετικές ιδιότητες συμμετρίας για τις κυματικές εξισώσεις spin των ηλεκτρονίων.

Σε ένα σύστημα με δυο spin, η ενέργεια ανταλλαγής ορίζεται ως η ενεργειακή διαφορά μεταξύ της κατανομής παράλληλων και της κατανομής αντιπαράλληλων spin [15]. Για ένα σύστημα με περισσότερα spin, η ενέργεια ανταλλαγής δίνεται από την αναμενόμενη τιμή της Χαμιλτονιανής εξίσωσης του Heisenberg:

$$H_{ex} = -2 \sum_{i < j} J_{ij} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \quad (6)$$

όπου J_{ij} είναι το ολοκλήρωμα ανταλλαγής το οποίο περιγράφει τη σύζευξη μεταξύ δύο spin ή δυο μαγνητικών ροπών, οι οποίοι περιγράφονται από τους γεννήτορες spin \hat{S}_i και \hat{S}_j . Ανάλογα με τις διατομικές αποστάσεις (και συνεπώς την τροχιακή επικάλυψη) οι τιμές του J_{ij} θα μπορούσαν να έχουν θετικό ή αρνητικό πρόσημο, με αποτέλεσμα την παράλληλη ή αντιπαράλληλη κατανομή των spin αντίστοιχα.



Εικόνα 10. Ενέργεια άμεσης ανταλλαγής ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης r , διαιρεμένη με την ακτίνα d της τροχιάς r_d [8]. Η αρνητική τιμή της ενέργειας ανταλλαγής έχει ως αποτέλεσμα μια αντισιδερομαγνητική ευθυγράμμιση των spin, ενώ η θετική τιμή της ενέργειας οδηγεί σε μια σιδερομαγνητική σύζευξη. Το φαινόμενο αυτό απεικονίζεται με κόκκινη βέλη. Η καμπύλη είναι γνωστή και ως καμπύλη Bethe-Slater

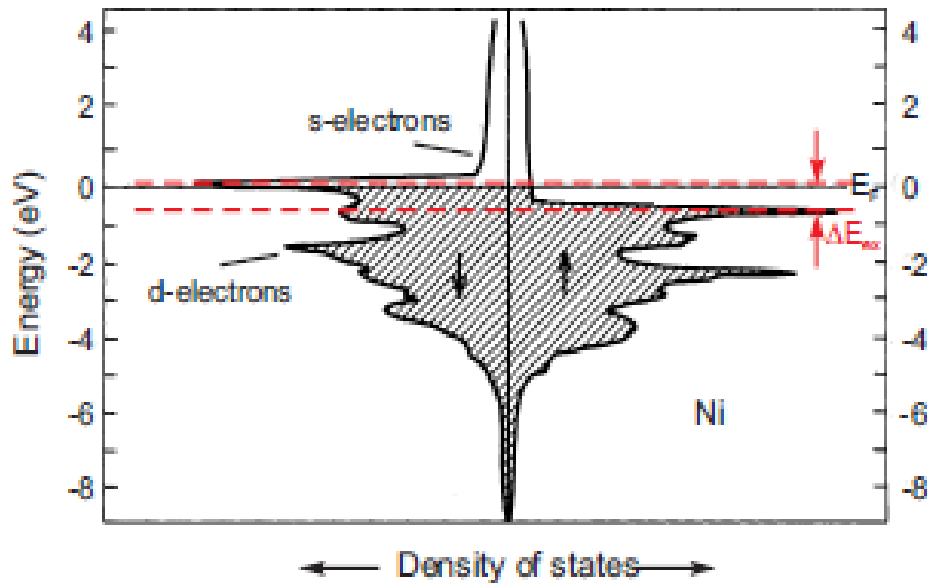
Η άμεση ανταλλαγή ηλεκτρονίων είναι ένα φαινόμενο μικρής εμβέλειας. Στην περίπτωση που η διατομική απόσταση είναι πολύ μεγάλη, δηλαδή η κυματική εξίσωση επικάλυψης πολύ μικρή, το φαινόμενο της άμεσης ανταλλαγής δεν είναι αρκετά ισχυρό ώστε να ξεπεράσει το φαινόμενο της θερμικής διέγερσης, με αποτέλεσμα να εμφανίζονται παραμαγνητικά φαινόμενα.

Περιοδεύουσα ανταλλαγή

Σε μεταλλικά συστήματα τριών διαστάσεων, όπως το κοβάλτιο (Co), ο σίδηρος (Fe) και το νικέλιο (Ni), τόσο οι μαγνητικές ροπές όσο και η αλληλεπίδραση ανταλλαγής, οφείλονται σε μη εντοπισμένα ηλεκτρόνια, ή αλλιώς, σε περιοδεύοντα ηλεκτρόνια.

Συνεπώς, δεν είναι δυνατόν να περιγραφούν οι μαγνητικές ιδιότητες των μετάλλων, με όρους ατομικής ροπής ή ροπής ιόντων, συνδυάζοντας παράλληλα την αλληλεπίδραση ανταλλαγής μεταξύ των διάφορων περιοχών. Αυτό αποτελεί συνέπεια της απωστικής ενέργειας Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων και της κινητικής τους ενέργειας, οι ζώνες με αντίθετο προσανατολισμό spin διαχωρίζονται, δημιουργώντας μια

μη μηδενική συνολική μαγνητική ροπή, εμφανίζοντας δηλαδή φαινόμενα σιδηρομαγνητισμού.



Εικόνα 11. Πυκνότητα καταστάσεων διαχωρισμένων spin σε Ni [16]. Το ΔE_x υποδηλώνει την ενέργεια ανταλλαγής διαχωρισμού

Αυτή η ανταλλαγή διαχωρισμού συνήθως περιγράφεται χρησιμοποιώντας το μοντέλο Stoner, όπου η ενέργεια ανταλλαγής διαχωρισμού δίνεται από τη σχέση $\Delta E_x = IM$ όπου, I η παράμετρος ανταλλαγής Stoner και M η μέση ατομική μαγνήτιση.

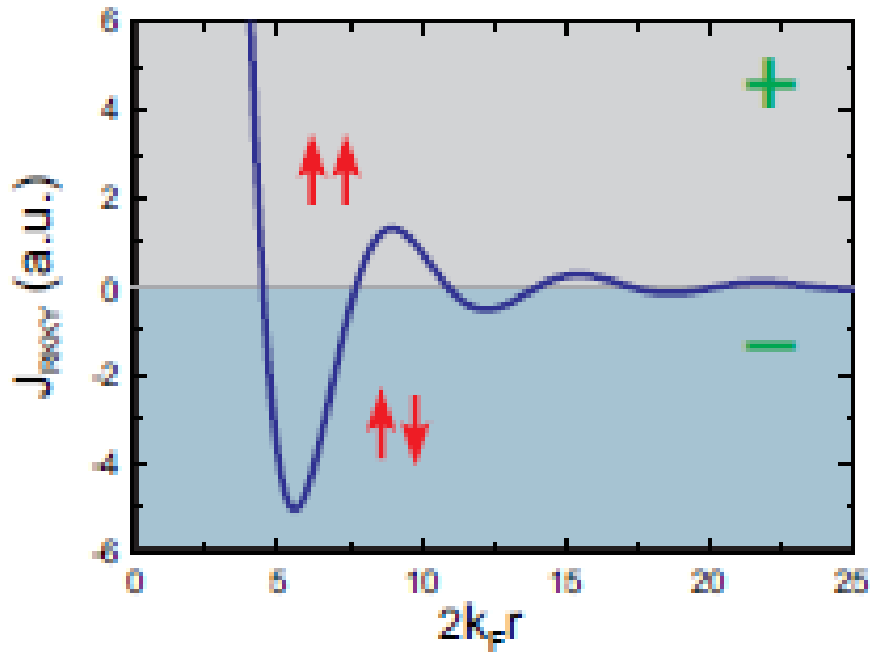
Με βάση το μοντέλο αυτό, η σταθερότητα της αυθόρμητης μαγνήτισης δίνεται από το κριτήριο Stoner $IN(E_F) > 1$, όπου $N(E_F)$ η πυκνότητα καταστάσεων στο επίπεδο Fermi.

Στα σιδηρομαγνητικά υλικά παρατηρείται υψηλή πυκνότητα καταστάσεων στο επίπεδο Fermi και ισχυρά φαινόμενα διαχωρισμού [16]. Η συνολική μαγνητική ροπή δεν διέπεται από τους ατομικούς κανόνες. Αντίθετα, εξαρτάται από τους άνισους πληθυσμούς ηλεκτρονίων με διαφορετικό προσανατολισμό spin, που ορίζονται από τη θέση του επιπέδου Fermi στη ζώνη αγωγιμότητας. Ως εκ τούτου, οι μαγνητικές ροπές σε 3d μέταλλα και τα κράματά τους εμφανίζουν αρκετά τακτική εξάρτηση από τον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους, η οποία είναι γνωστή ως εξάρτηση Slater-Pauling [13].

RKKY ανταλλαγή

Η RKKY έμμεση αλληλεπίδραση ανταλλαγής ενέργειας ονομάστηκε από τους Rudermann, Kittel, Kasuya και Yoshida. Κατέχει έναν πολύ σημαντικό ρόλο στις περιπτώσεις όπου δεν υπάρχει άμεση επικάλυψη των κυματικών εξισώσεων των ασύζευκτων ηλεκτρονίων. Στις περιπτώσεις αυτές, η αλληλεπίδραση μεταξύ δύο

μαγνητικών ροπών, στις περιοχές i και j , επιτυγχάνεται από την πόλωση του ηλεκτρονίου αγωγιμότητας. Χαρακτηριστικό αυτού του μηχανισμού σύζευξης είναι η ταλαντωτική συμπεριφορά του ολοκληρώματος ανταλλαγής J , το οποίο αλλάζει πρόσημο ως συνάρτηση της απόστασης των εντοπισμένων περιοχών (Εικ. 12).



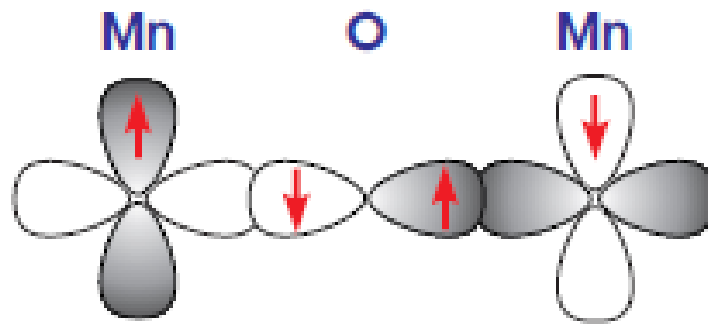
Εικόνα 12. Ενέργεια ανταλλαγής RKKY σε συνάρτηση με τη διατομική απόσταση r , πολλαπλασιασμένη με την ακτίνα της σφαίρας Fermi k_F [15]

Μεταξύ άλλων, ο μηχανισμός αυτός εξηγεί τη σύζευξη των ηλεκτρονίων 4f στις σπάνιες γαίες. Σε αντίθεση με την άμεση ανταλλαγή, αυτός ο τύπος αλληλεπίδρασης είναι μακράς εμβέλειας.

Υπερανταλλαγή

Η υπερανταλλαγή είναι ένα ακόμα είδος έμμεσης αλληλεπίδρασης και είναι σημαντικό σε στερεά ιόντων, όπως τα οξείδια μετάλλων μετάπτωσης και τα φθορίδια.

Το πιο χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι το MnO. Η αλληλεπίδραση μεταξύ των μαγνητικών ατόμων Mn προκαλείται από το διαμαγνητικό οξυγόνο μέσω της επικάλυψης του τροχιακού 3d του μετάλλου και του τροχιακού 2p του οξυγόνου, και μια μερική μετεγκατάσταση των εμπλεκόμενων ηλεκτρονίων.



Εικόνα 13. Σχηματική αναπαράσταση της υπερανταλλαγής μεταξύ δύο ατόμων Mn και ενός ατόμου οξυγόνου.

Στην περίπτωση παράλληλου προσανατολισμού των μαγνητικών ροπών που βρίσκονται στα κέντρα των μετάλλων, δεν παρουσιάζεται μετεγκατάσταση, γεγονός που καθιστά την αντισιδηρομαγνητική ευθυγράμμιση ενεργειακά ευνοϊκή [17].

Γενικά, το μέγεθος της υπερανταλλαγής εξαρτάται από το μέγεθος των μαγνητικών ροπών στο άτομο του μετάλλου, την τροχιακή επικάλυψη μεταξύ του μετάλλου, και του μη μεταλλικού στοιχείου και την γωνία δεσμού.

3. Μαγνητικά Τοιχώματα

Μια πρώτη επιβεβαίωση της έννοιας της μαγνητικής περιοχής βρέθηκε από τον Barkhausen [18]. Ανακάλυψε ότι η διαδικασία μαγνήτισης είναι συχνά ασυνεχής, εμφανίζοντας ένα χαρακτηριστικό θόρυβο όταν ακούγεται από έναν ενισχυτή. Αρχικά, τα άλματα Barkhausen είχαν ερμηνευθεί ως αλλαγή περιοχής. Αν και η ερμηνεία αυτή δεν θεωρείται έγκυρη ακόμη και σήμερα, η περαιτέρω μελέτη του φαινομένου Barkhausen οδήγησε σε μια καθοριστική ανακάλυψη.

Ορισμένα πειράματα έδειξαν ότι στην πραγματικότητα μόνο ένα γιγάντιο άλμα οδηγεί άμεσα από μια κορεσμένη κατάσταση σε μια αντίθετα κορεσμένη [19, 20]. Η ανάλυση της δυναμικής αυτής διαδικασίας οδήγησε στο συμπέρασμα ότι τα εν λόγω άλματα θα μπορούσαν να συμβούν μόνο με μια χωρικά ανομοιογενή διαδικασία [21], δηλαδή μόνο από την ύπαρξη ενός ορίου μεταξύ των περιοχών με αντίθετη μαγνήτιση. Αυτή η υπόθεση σύντομα επιβεβαιώθηκε από τα διάσημα πειράματα των Sixtus και Tonks [21]. Τα πειράματα αυτά ενέπνευσαν τον Bloch [22] να αναλύσει θεωρητικά τη μετάβαση μεταξύ των περιοχών, διαπιστώνοντας ότι τα τοιχώματα που χωρίζουν τις περιοχές με διαφορετική κατεύθυνση μαγνήτισης, πρέπει να έχουν πλάτος αρκετών εκατοντάδων πλεγματικών σταθερών, εξαιτίας της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής του Heisenberg που αντιτίθεται σε μια απότομη μετάβαση [23].

Ωστόσο, είναι επιστημονικά αποδεδειγμένο [24] ότι τα μαγνητικά τοιχώματα αποτελούν τα χωρίσματα των μαγνητικών περιοχών, στις οποίες η μαγνήτιση έχει διαφορετικό προσανατολισμό. Μέσα στο τοίχωμα, η μαγνήτιση αλλάζει κατεύθυνση από αυτή της μίας περιοχής στην άλλη.

Τα τοιχώματα αυτά δεν είναι απείρως λεπτά αλλά έχουν ένα πεπερασμένο πλάτος. Το πάχος τους ουσιαστικά είναι ένας συμβιβασμός ανάμεσα στην ενέργεια ανταλλαγής, που απαιτεί την ύπαρξη ενός τοιχώματος μεγάλου πάχους, και την ενέργεια ανισοτροπίας, που απαιτεί την ύπαρξη ενός λεπτού τοιχώματος. Θα αναφερθούμε λεπτομερέστερα στην ενέργεια ανισοτροπίας παρακάτω.

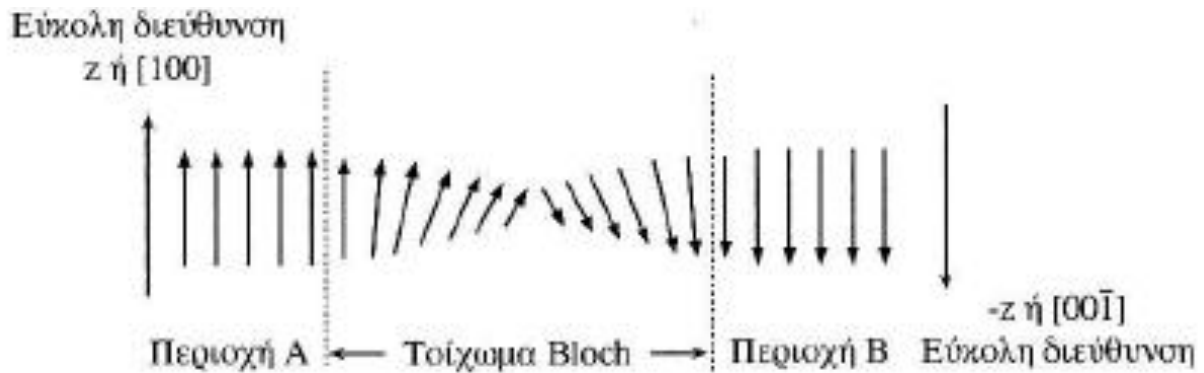
Ένα στενό τοίχωμα θα δημιουργούσε μεγάλες γωνίες ανάμεσα στα γειτονικά spin και η ενέργεια ανταλλαγής θα ήταν μεγάλη, ενώ σε ένα ευρύ τοίχωμα, πολλά από τα spin θα έχουν κατεύθυνση μακριά από τις διευθύνσεις εύκολης μαγνήτισης με αποτέλεσμα την αύξηση της ενέργειας ανισοτροπίας. Έτσι το πάχος ισορροπίας είναι αυτό για το οποίο ελαχιστοποιείται η συνολική δυναμική ενέργεια, η οποία είναι το άθροισμα της ενέργειας ανταλλαγής και της ενέργειας ανισοτροπίας εντός του τοιχώματος.

3.1. Μαγνητικά Τοιχώματα 180° και μη 180°

Γενικά, τα μαγνητικά τοιχώματα μπορούν να ταξινομηθούν σε τοιχώματα 180° και σε μη- 180° , δηλαδή σε τοιχώματα που χωρίζουν αντιπαράλληλες και μη αντιπαράλληλες μαγνητικές περιοχές.

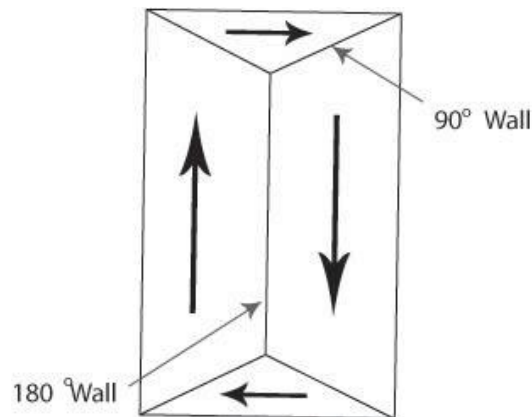
Τα τοιχώματα 180° συναντώνται σχεδόν σε όλα τα υλικά και διαφέρουν από όλα τα άλλα τοιχώματα στο ότι δεν επηρεάζονται από την επιβολή μηχανικής τάσης [25]. Στα τοιχώματα αυτά οι διευθύνσεις της μαγνήτισης σε γειτονικές περιοχές είναι αντιπαράλληλες και κατά συνέπεια οι μαγνητικές ροπές των περιοχών αυτών έχουν διευθύνσεις ισοδύναμων κρυσταλλογραφικών διευθύνσεων.

Στην Εικόνα 14 απεικονίζεται ένα τοίχωμα 180° που διαχωρίζει δύο περιοχές με μαγνήτιση σε αντίθετες διευθύνσεις. Οι γειτονικές μαγνητικές ροπές spin περιστρέφονται σταδιακά και η περιστροφή είναι πλήρης σε διάστημα αρκετών ατομικών αποστάσεων. Η ύπαρξη των δυνάμεων ανταλλαγής ανάμεσα στα γειτονικά ατομικά spin καθιστά ενεργειακά προτιμότερη τη μικρή σχετική περιστροφή. Αν επιδρούσαν μόνο οι δυνάμεις ανταλλαγής, τότε η σχετική περιστροφή των γειτονικών spin θα ήταν τόσο μικρή που το πάχος του τοιχώματος 180° θα ήταν άπειρο. Αν η μαγνήτιση περιστρέφεται γύρω από άξονα κάθετο στην επιφάνεια του τοιχώματος, τότε το τοίχωμα καλείται τοίχωμα Bloch [26].



Εικόνα 14. Σχηματική αναπαράσταση της διεύθυνσης των μαγνητικών ροπών στο τοίχωμα μεταξύ δύο γειτονικών μαγνητικών περιοχών με αντίθετες διευθύνσεις.

Στα υλικά που κρυσταλλώνονται στο κυβικό σύστημα, τα τοιχώματα μη- 180° είναι όλα 90° , έτσι ώστε οι διευθύνσεις των δίπολων σε γειτονικές μαγνητικές περιοχές να είναι ορθές γωνίες (Εικ. 15). Γι' αυτό στο σίδηρο, που οι κύριοι άξονες είναι στις διευθύνσεις $[100]$, τα μαγνητικά τοιχώματα ανάμεσα στις διευθύνσεις $[100]$ και $[\bar{1}00]$ είναι όλα 180° , ενώ αυτά που είναι ανάμεσα στις διευθύνσεις $[100]$ και $[010]$ είναι τοιχώματα 90° .



Εικόνα 15. Απεικόνιση μαγνητικών τοιχωμάτων 180° και 90°

Συχνά όλα τα μη -180° μαγνητικά τοιχώματα αναφέρονται εσφαλμένα ως τοιχώματα 90° για να τονίζεται η ευαισθησία που έχουν στην επιβολή μηχανικής τάσης σε σχέση με τα τοιχώματα 180° .

3.2. Κίνηση μαγνητικών τοιχωμάτων

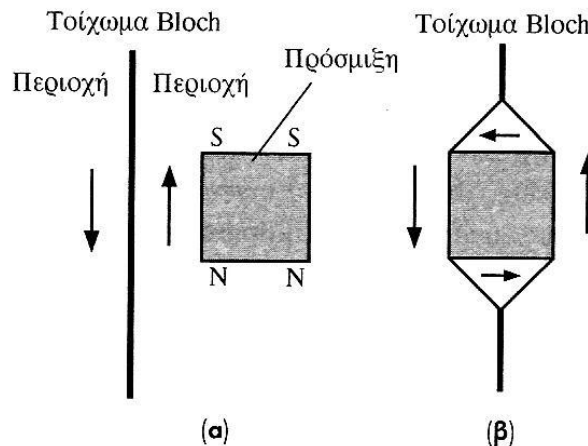
Για να μαγνητιστεί ένας σιδηρομαγνητικός μονοκρυστάλλος θα πρέπει να μετακινηθούν τα τοιχώματα των περιοχών που έχουν μαγνήτιση παράλληλη προς το επιβαλλόμενο πεδίο εις βάρος των περιοχών των οποίων η μαγνήτιση είναι αντίθετη προς τη μαγνήτιση του επιβαλλόμενου πεδίου.

Η μετακίνηση ενός τοιχώματος εντός ενός κρυστάλλου επηρεάζεται από τις κρυσταλλικές ατέλειες και τις προσμίξεις και δεν είναι ομαλή [27]. Για παράδειγμα σε ένα τοίχωμα Bloch 90° , η διεύθυνση της μαγνήτισης μεταβάλλεται κατά 90° κατά τη διέλευση μέσα από το τοίχωμα. Λόγω της μαγνητικής παραμόρφωσης, η παραμόρφωση του πλέγματος δεν είναι ίδια στις δύο πλευρές του τοιχώματος αυτού και έτσι δημιουργείται μια περίπλοκη κατανομή παραμόρφωσης, και επομένως, και τάσης.

Όπως γνωρίζουμε, οι κρυσταλλικές ατέλειες όπως οι διαταραχές, οι σημειακές ατέλειες κλπ, δημιουργούν γύρω τους κατανομές παραμόρφωσης και τάσης. Άρα, τα τοιχώματα των περιοχών και οι κρυσταλλικές ατέλειες αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Οι διαταραχές είναι γραμμικές ατέλειες οι οποίες παραμορφώνουν το πλέγμα σε αρκετή απόσταση γύρω τους.

Αν το τοίχωμα πλησιάσει πολύ στη διαταραχή, τότε οι θλιπτικές και εφελκυστικές τάσεις αλληλοαναιρούνται και το τελικό αποτέλεσμα είναι η δημιουργία ενός απαραμόρφωτου πλέγματος, το οποίο χαρακτηρίζεται από μικρότερη ενέργεια παραμόρφωσης. Η διάταξη που χαρακτηρίζεται από χαμηλότερη ενέργεια, κρατάει το τοίχωμα της περιοχής κοντά στη διαταραχή. Για να απομακρυνθεί τώρα το τοίχωμα από τη διαταραχή απαιτείται η εφαρμογή ισχυρότερου μαγνητικού πεδίου.

Τα τοιχώματα μεταξύ των περιοχών επηρεάζονται επίσης και από τις μη μαγνητικές προσμίξεις και τα εγκλείσματα. Η μείωση της μαγνητοστατικής δυναμικής ενέργειας σημαίνει ότι απαιτείται πλέον μεγαλύτερη δύναμη για να απομακρυνθεί το τοίχωμα από το έγκλεισμα. Η πρόσμιξη επομένως συγκρατεί κατά κάποιο τρόπο το τοίχωμα, παρεμποδίζοντας την κίνησή του.



Εικόνα 16. Αλληλεπίδραση ενός τοιχώματος με ένα μαγνητικό έγκλεισμα (χωρίς μόνιμη μαγνήτιση). α) Το έγκλεισμα μαγνητίζεται και υπάρχει μαγνητοστατική ενέργεια. β) Η διάταξη αυτή έχει μικρότερη δυναμική ενέργεια και για αυτό είναι προτιμότερη.

Επομένως, βλέπουμε ότι η κίνηση ενός τοιχώματος εντός κρυστάλλου δεν είναι ομαλή, αλλά πραγματοποιείται με απότομα άλματα. Το τοίχωμα συγκρατείται σε κάποιο σημείο από μια ατέλεια ή πρόσμιξη και για να ελευθερωθεί απαιτείται η εφαρμογή ενός ισχυρότερου μαγνητικού πεδίου. Μόλις αποδεσμευτεί το τοίχωμα κινείται μέχρις ότου δεσμευτεί από μια άλλη ατέλεια, όπου και παραμένει μέχρι το πεδίο να αυξηθεί ακόμα περισσότερο και να αποδεσμευτεί εκ νέου. Κάθε φορά που το τοίχωμα αποδεσμεύεται παράγονται πλεγματικές ταλαντώσεις, που σημαίνει ότι το μέρος της ενέργειας χάνεται ως θερμότητα.

Η συνολική κίνηση του τοιχώματος είναι μη αντιστρέψιμη και συνεπάγεται απώλεια ενέργειας με τη μορφή θερμότητας που διοχετεύεται στον κρύσταλλο.

4. Ενεργειακή θεώρηση

Ο μικρομαγνητισμός και η θεωρία των μαγνητικών τοιχωμάτων στηρίζονται στην ίδια αρχή η οποία προέρχεται από τις αρχές της θερμοδυναμικής. Σύμφωνα με τις αρχές αυτές, το διανυσματικό μέγεθος της κατεύθυνσης της μαγνήτισης

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{J}(\mathbf{r})/J_s \quad (7)$$

επιλέγεται έτσι ώστε η συνολική (ελεύθερη) ενέργεια να φτάνει ένα απόλυτο ή σχετικό ελάχιστο, υπό τη συνθήκη $\mathbf{m}^2=1$. Στην παρούσα μελέτη, αγνοούνται οι σπάνιες περιπτώσεις κατά τις οποίες ο περιορισμός αυτός δεν ισχύει, δηλαδή τις περιπτώσεις όπου η μαγνήτιση κόρου J_s ποικίλει μέσα στην μικρομαγνητική κατανομή.

Μια αναγκαία συνέπεια της αρχής ελάχιστης ενέργειας και του περιορισμού του μέτρου του διανύσματος της μαγνήτισης, είναι ότι σε κάθε σημείο, η ροπή της μαγνήτισης η οποία προκύπτει από διαφορικούς υπολογισμούς της ενέργειας, πρέπει να εξαιρεθεί. Οι συνθήκες που αφορούν τις ροπές αυτές ονομάζονται μικρομαγνητικές εξισώσεις και θα αναλυθούν εκτενέστερα παρακάτω. Παρόλα αυτά, οι συνεισφορές στην ενέργεια, οι οποίες εξαρτώνται από τη μαγνήτιση, είναι το σημείο εκκίνησης, τόσο της θεωρίας των μαγνητικών τοιχωμάτων, όσο και των εξισώσεων του μικρομαγνητισμού.

4.1. Τοπικοί και μη τοπικοί όροι ενέργειας

Θα ήταν χρήσιμο να γίνει ένας διαχωρισμός μεταξύ των τοπικών και των μη τοπικών μαγνητικών όρων της ενέργειας. Οι τοπικοί όροι (local terms) βασίζονται στις πυκνότητες της ενέργειας, οι οποίες δίνονται από τις τοπικές τιμές της κατεύθυνσης της μαγνήτισης μόνο. Το ολοκλήρωμα τους υπολογίζεται από μια απλή ολοκλήρωση της

μορφής $E_{loc} = \int f(\mathbf{m}) dV$ πάνω στο δείγμα, όπου η εξίσωση πυκνότητας της ενέργειας $f(\mathbf{m})$ είναι μια αυθαίρετη εξίσωση της κατεύθυνσης μαγνήτισης \mathbf{m} .

Παραδείγματα τοπικών όρων ενέργειας είναι η ενέργεια ανισοτροπίας, η ενέργεια πεδίου (Zeeman) και η μαγνητοελαστική ενέργεια αλληλεπίδρασης με ένα πεδίο τάσεων μη μαγνητικής προέλευσης. Η ενέργεια ανταλλαγής είναι επίσης ένας όρος της ενέργειας ο οποίος θα μπορούσε να χαρακτηριστεί τοπικός, κατά μια έννοια, καθώς υπολογίζεται από ένα ολοκλήρωμα πάνω σε μια συνάρτηση των παραγώγων της κατεύθυνσης της μαγνήτισης.

Δύο όροι συνεισφοράς στην ενέργεια οι οποίοι θα μπορούσαν να χαρακτηριστούν ως μη τοπικοί (non local) είναι η ενέργεια ελεύθερου πεδίου (stray field) και η ενέργεια αυτό-μαγνητοσυστολής (magnetostrictive self - energy), η ενέργεια, η οποία συνδέεται με ελαστικές αντιδράσεις μεταξύ περιοχών, που έχουν κατεύθυνση μαγνήτισης σε διαφορετικούς άξονες. Αυτοί οι όροι ενέργειας προκαλούν μαγνητικές ροπές οι οποίες, όπου το κάθε σημείο της κατεύθυνσης μαγνήτισης εξαρτάται από κάποιο άλλο σημείο.

Οι μη τοπικοί όροι της ενέργειας δεν μπορούν να υπολογιστούν με ένα απλό ολοκλήρωμα. Συνήθως χρειάζονται δύο χωρικά ολοκληρώματα για τους όρους αυτούς. Οι μη τοπικοί όροι είναι αυτοί που κάνουν τον μικρομαγνητισμό και τη θεωρία των μαγνητικών τοιχωμάτων περισσότερο πολύπλοκα και ενδιαφέροντα.

4.2. Ενέργεια ανταλλαγής

Ενέργεια δυσκαμψίας ανταλλαγής (Exchange Stiffness Energy)

Η θεμελιώδης ιδιότητα ενός σιδηρομαγνήτη είναι η προτίμηση του σε μια σταθερή κατεύθυνση μαγνήτισης. Αποκλίσεις από την ιδεατή κατάσταση, περιγράφονται από μια έκφραση δυσκαμψίας για την ενέργεια, μέσω της σχέσης:

$$E_x = A \int (\text{grad } \mathbf{m})^2 dV \quad (8)$$

όπου A είναι μια σταθερά που εξαρτάται από το υλικό, με διαστάσεις J/m ή erg/cm, η οποία εξαρτάται και από τη θερμοκρασία. Η τιμή της για το αντίστοιχο σημείο μηδέν της θερμοκρασίας σχετίζεται με τη θερμοκρασία Curie, μέσω της σχέσης:

$$A(0) \approx kT_c/a_L, \quad (9)$$

όπου a_L η σταθερά πλέγματος και k η σταθερά Boltzmann.

Μια πιο αναλυτική μορφή της παραπάνω έκφρασης είναι:

$$\begin{aligned} E_x &= A[(\text{grad } \mathbf{m}_1)^2 + (\text{grad } \mathbf{m}_2)^2 + (\text{grad } \mathbf{m}_3)^2] = \\ &= A[m_{1,x}^2 + m_{1,y}^2 + m_{1,z}^2 + m_{2,x}^2 + m_{2,y}^2 + m_{2,z}^2 + m_{3,x}^2 + m_{3,y}^2 + m_{3,z}^2] \end{aligned} \quad (10)$$

όπου $m_{1,x}^2 = \partial m_1 / \partial x$ κλπ. Η έκφραση αυτή προκύπτει από την ανάλυση Taylor της ιστροπικής αλληλεπίδρασης Heisenberg [23] μεταξύ δύο γειτονικών spin. Επιβάλλει ένα «πρόστιμο» ενέργειας σε περίπτωση αλλαγής της κατεύθυνσης μαγνήτισης [28]. Η ενέργεια ανταλλαγής καλείται ιστροπική καθώς είναι ανεξάρτητη της αλλαγής που αφορά την κατεύθυνση μαγνήτισης. Παρόλο που η αλληλεπίδραση Heisenberg μεταξύ γειτονικών spin δεν είναι εφαρμόσιμη, περιγράφει ικανοποιητικά το φαινόμενο «δυσκαμψίας» που παρατηρείται.

Μια συστηματική ανάλυση του όρου της δυσκαμψίας θα μπορούσε να προκύψει μέσα από την γενική της έκφραση:

$$E_x = \int \sum_{i,k,l} A_{kl} \frac{\partial m_i}{\partial x_k} \frac{\partial m_i}{\partial x_l} dV \quad (11)$$

Ο συμμετρικός τανυστής A εκφυλίζεται σε βαθμωτό για κυβικά ή ιστροπικά υλικά. Εξαγωνικά ή χαμηλότερης συμμετρίας κρύσταλλοι απαιτούν περισσότερες από μία σταθερές ανταλλαγής. Στην πραγματικότητα, η ιστροπική έκφραση χρησιμοποιείται σε όλες τις διαδικασίες καθώς δεν υπάρχει, μέχρι στιγμής, πειραματική επιβεβαίωση των ανιστροπικών συντελεστών της ενέργειας ανταλλαγής.

Τέλος, υπάρχει μια έκφραση της ενέργειας ανταλλαγής, κατά την οποία η κλίση αφορά τα συνημίτονα που περιγράφουν την κατεύθυνση μαγνήτισης ως προς τον εύκολο άξονα μαγνήτισης του υλικού. Θεωρώντας και πάλι, σταθερό το μέτρο της μαγνήτισης, η εξίσωση έχει τη μορφή:

$$E_x = A \int [(\nabla\alpha)^2 + (\nabla\beta)^2 + (\nabla\gamma)^2] dS \quad (12)$$

$$E_x = -A \int [(\alpha\Delta\alpha)^2 + (\beta\Delta\beta)^2 + (\gamma\Delta\gamma)^2] dS \quad (13)$$

Όπου α, β, γ τα συνημίτονα κατεύθυνσης. Η έκφραση αυτή είναι η απλούστερη μορφή της ενέργειας ανταλλαγής, η οποία όμως περιγράφει πλήρως το φαινόμενο «δυσκαμψίας» και είναι κατάλληλη στην περίπτωση περιγραφής με υπολογιστικά μοντέλα.

Ανταλλαγή επαφής σύζευξης

Όταν ένας σιδηρομαγνήτης έρθει σε επαφή με κάποιον άλλον (όπως σε πολυστρωματικά λεπτά φιλμ), μια αλληλεπίδραση ανταλλαγής μπορεί να ενώσει τα δύο μέσα [29]. Στη γενική περίπτωση, η δύναμη σύζευξης δεν μπορεί να προέλθει από τις ιδιότητες των δύο συμμετεχόντων. Εξαρτάται από την ακριβή φύση της διεπαφής, μπορεί να είναι εξασθενημένη σε σχέση με την εσωτερική ανταλλαγή που γίνεται σε μεγαλύτερο βάθος, είτε να υπερτερεί.

Φαινομενολογικά, όλες οι περιπτώσεις μπορούν να περιγραφούν από την παρακάτω έκφραση της έντασης της επιφανειακής ενέργειας:

$$E_{coupl} = c_{bl}(1 - \mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2) + c_{bq}[(1 - \mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2)^2] \quad (14)$$

Τα m_1 και m_2 είναι τα διανύσματα μαγνήτισης στη διεπαφή, c_{bl} είναι η διγραμμική σταθερά και c_{bq} τετραγωνική σταθερά σύζευξης. Αν το c_{bl} είναι θετικό, τότε προτιμάται η παράλληλη κατεύθυνση μαγνήτισης των δύο μέσων (σιδηρομαγνητική σύζευξη). Στην περίπτωση που το c_{bl} είναι αρνητικό, η αντιπαράλληλη ευθυγράμμιση είναι προτιμότερη (αντισιδηρομαγνητική σύζευξη). Μια αρνητική τιμή του c_{bq} θα μπορούσε να οδηγήσει σε κάθετη ευθυγράμμιση των κατευθύνσεων μαγνήτισης, αν και το c_{bl} είναι μικρό.

Σύμφωνα με τα όσα είναι γνωστά μέχρι σήμερα, η προέλευση των δύο όρων σύζευξης είναι αρκετά διαφορετική. Ο διγραμμικός όρος είναι στενά συνδεδεμένος με το φαινόμενο ανταλλαγής δυσκαμψίας και προέρχεται από τις ίδιες αρχές της κβαντικής μηχανικής. Σε αντίθεση, ο τετραγωνικός όρος αποδίδεται σε διάφορους μηχανισμούς μικροσκοπικών χωρικών διακυμάνσεων.

Για την μελέτη του μικρομαγνητισμού και της θεωρίας μαγνητικών τοιχωμάτων, το ζήτημα της φύσης των αποτελεσμάτων της σύζευξης μπορεί να αγνοηθεί.

4.3. Ενέργεια ανισοτροπίας

Η ενέργεια ενός σιδηρομαγνήτη εξαρτάται από την κατεύθυνση της μαγνήτισης σε σχέση με τους εύκολους άξονες δόμησης του υλικού. Η εξάρτηση αυτή, η οποία είναι αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης spin τροχιάς, περιγράφεται από την ενέργεια ανισοτροπίας [30].

Υπάρχει διαχωρισμός μεταξύ της κρυσταλλικής ανισοτροπίας της αδιατάραχης κρυσταλλικής δομής και της επαγόμενης ανισοτροπίας η οποία περιγράφει φαινόμενα που αποκλίνουν από την ιδεατή συμμετρία, όπως για παράδειγμα οι ατέλειες του πλέγματος ή τη μερική ατομική διάταξη. Τα φαινόμενα που αφορούν το σχήμα δεν εμπίπτουν στους ανισοτροπικούς όρους. Είναι μέρος της ενέργειας ελεύθερου πεδίου (stray field) και θα αναλυθούν στη συνέχεια.

Οποιαδήποτε και αν είναι η προέλευση της ανισοτροπίας, πρέπει να συνάδει με τη συμμετρία της κατάστασης. Ως εκ τούτου, χρησιμοποιούνται επεκτάσεις σε όρους σφαιρικών αρμονικών για να περιγραφούν οι πιο σημαντικές συνεισφορές. Σπάνια κρίνεται αναγκαίο να συμπεριληφθούν στη μελέτη περισσότεροι από τους δύο πρώτους όρους, καθώς η θερμική διέγερση τείνει να εξαλείψει τους όρους μεγαλύτερης τάξης.

Μόνο σε χαμηλές θερμοκρασίες έχουν παρατηρηθεί όροι υψηλότερης τάξης [31], εξαιτίας της αλληλεπίδρασης του spin με τις υψηλά ανιστροπικές επιφάνειες Fermi.

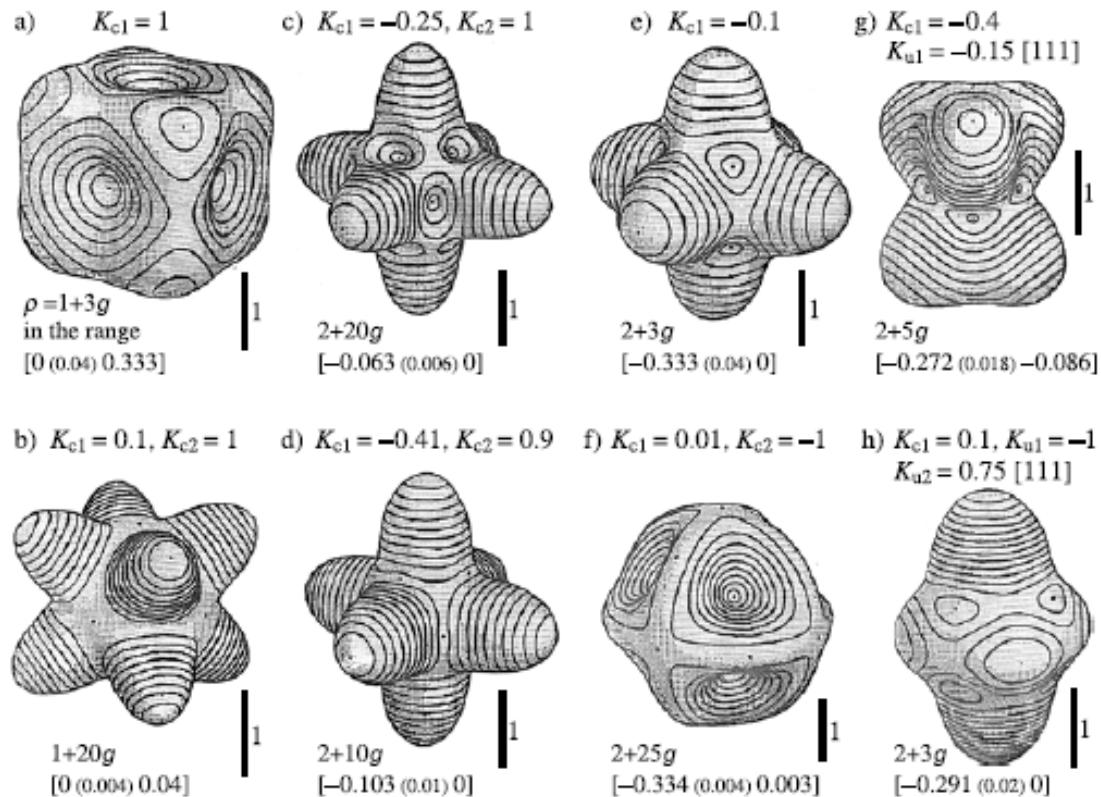
Κυβική ανιστροπία

Η βασική εξίσωση για την πυκνότητα ενέργειας σε ένα κυβικό κρύσταλλο είναι:

$$E_{K_c} = K_{c1} (m_1^2 m_2^2 + m_1^2 m_3^2 + m_2^2 m_3^2) + K_{c2} m_1^2 m_2^2 m_3^2 \quad (15)$$

όπου m_i είναι η μαγνήτιση κατά μήκος των κυβικών αξόνων.

Η σταθερά του υλικού K_{c2} και μεγαλύτεροι όροι από αυτή μπορούν να παραλειφθούν. Η σταθερά K_{c1} κυμαίνεται σε εύρος $\pm 104 \text{ J/m}^3$ για διαφορετικά υλικά. Το πρόσημο της K_{c1} καθορίζει εάν οι $\langle 100 \rangle$ ή $\langle 111 \rangle$ είναι οι εύκολοι άξονες μαγνήτισης. Η παρακάτω εικόνα δίνει μια γραφική αναπαράσταση της συνεισφοράς της ενέργειας ανιστροπίας.



Εικόνα 17. «Ενεργειακές» επιφάνειες οι οποίες ορίζονται ως $\rho = A + Bg$, όπου g είναι μια γενική ανιστροπική εξίσωση. Οι τιμές των σταθερών, όπως επίσης και ο συντελεστής κλίμακας φαίνονται πάνω και κάτω από τα σχήματα [28]. (a,b) κυβική ανιστροπία με $\langle 100 \rangle$ άξονες διεύθυνσης. (c,d) κυβική ανιστροπία με $\langle 110 \rangle$ άξονες διεύθυνσης. (e,f) κυβική με $\langle 111 \rangle$ άξονες διεύθυνσης. (g) κυβική και μονοαξονική συμμετρία με άξονα υπέρθεσης το $[111]$. (h) κυβική και κωνική συμμετρία με άξονα υπέρθεσης το $[111]$.

Μονοαξονική και ορθορομβική ανισοτροπία

Εξαγωνικοί και τετραγωνικοί κρύσταλλοι εμφανίζουν μια μονοαξονική συμμετρία, η οποία, μέχρι τους όρους τέταρτης τάξης δίνεται από τη σχέση:

$$E_{Ku} = K_{u1} \sin^2 \theta + K_{u2} \sin^4 \theta \quad (16)$$

όπου θ είναι η γωνία μεταξύ του άξονα ανισοτροπίας και της κατεύθυνσης της μαγνήτισης. Η ίδια εξίσωση εφαρμόζεται και σε επαγόμενη μονοαξονική συμμετρία.

Μια μεγάλη θετική τιμή της K_{u1} περιγράφει τον εύκολο άξονα, μια μεγάλη αρνητική τιμή της K_{u1} έναν επίπεδο προσανατολισμό κάθετα στον άξονα ανισοτροπίας. Για ενδιάμεσες τιμές, υπό τη συνθήκη $0 > K_{u1}/K_{u2} > -2$, οι εύκολες κατευθύνσεις βρίσκονται εντός ενός κώνου γωνίας θ , όπου η σχέση της γωνίας με τον άξονα δίνεται από τη σχέση $\sin^2 \theta = 1/2(K_{u1}/K_{u2})$. Εν συντομία, οι τρεις περιπτώσεις ονομάζονται «μονοαξονική», «επίπεδη», «κωνική» μαγνητική ανισοτροπία.

Η μονοαξονική ανισοτροπία μπορεί να είναι ισχυρότερη από την κυβική ανισοτροπία, φτάνοντας την τιμή 107 J/m^3 για μέταλλα μετάπτωσης σπάνιων γαίων.

Μερικές φορές πρέπει να ληφθεί υπόψη μια ανισοτροπία δεύτερης τάξης. Εμφανίζεται σε κρυστάλλους χαμηλότερης συμμετρίας από τετραγωνική ή εξαγωνική, ή σε περιπτώσεις υπέρθεσης μονοαξονικής ανισοτροπίας. Η πυκνότητα ενέργειας αυτής της ορθορομβικής ανισοτροπίας μπορεί να γραφεί ως:

$$E_{Ko} = \sum_{i,k} K_{i,k} m_i m_k \quad (17)$$

όπου K συμμετρικός τανυστής δεύτερης τάξης. Επιπλέον, οι επαγόμενες ανισοτροπίες οι οποίες οφείλονται σε ελαστικές τάσεις ή παραμορφώσεις μπορούν να περιγραφούν από την παραπάνω σχέση.

Επιφανειακή ανισοτροπία

Μια ακόμα ενέργεια ανισοτροπίας, η οποία εφαρμόζεται μόνο στην επιφανειακή μαγνήτιση και ονομάζεται επιφανειακή μαγνητική ανισοτροπία [32]. Σε ένα δομικά ιστροπικό μέσο, η επιφανειακή ανισοτροπία μπορεί να εκφραστεί ως εξής:

$$E_S = K_s [(1 - \mathbf{m} \cdot \mathbf{n})^2] \quad (18)$$

όπου \mathbf{n} το διάνυσμα της επιφάνειας. Η παραπάνω έκφραση πρέπει να ολοκληρωθεί σε όλη την επιφάνεια, συνεπώς, οι διαστάσεις της σταθεράς K_s είναι J/m^2 . Για θετικές τιμές

του K_s η επιφανειακή ενέργεια είναι μικρότερη για κάθετο προσανατολισμό της μαγνήτισης σε σχέση με την επιφάνεια [33].

Η τάξη μεγέθους του συντελεστή K_s (μεταξύ 10^{-3} έως 10^{-4} J/m²) είναι συχνά σημαντικά μεγαλύτερη από την τιμή που αποκτά κανείς αν πολλαπλασιάσει συντελεστές ανισοτροπικής ενέργειας με το πάχος ενός ατομικού επιπέδου. Το φαινόμενο αυτό αποδίδεται στο γεγονός της μειωμένης συμμετρίας του περιβάλλοντος της επιφάνειας των ατόμων.

Ανισοτροπία ανταλλαγής

Όλοι οι όροι ανισοτροπίας που έχουν αναφερθεί μέχρι στιγμής, είναι εξισώσεις που δεν αλλάζουν την τιμή της μαγνήτισης. Αυτό αποτελεί βασική προϋπόθεση για χημικά και κρυσταλλογραφικά ενιαία δείγματα. Μη ενιαία δείγματα, όπου συνυπάρχουν σιδηρομαγνητικές και αντισιδηρομαγνητικές φάσεις, παρουσιάζουν μαγνητικές καμπύλες μετατοπισμένες σε σχέση με τον άξονα του πεδίου [34].

Η σύζευξη μεταξύ των δύο φάσεων, μπορεί να περιγραφεί από ένα αποτελεσματικό πεδίο H_{XA} ή από μια ισοδύναμη σταθερά ανισοτροπίας «μίας κατεύθυνσης», K_{XA} . Αυτό οδηγεί σε έναν όρο ενέργειας της μορφής:

$$E_{XA} = -K_{XA} \cos \theta \quad (19)$$

όπου θ η γωνία μεταξύ της διεύθυνσης της μαγνήτισης και της προτιμώμενης διεύθυνσης του άξονα ανισοτροπίας.

Τα πολύπλοκα φαινόμενα της ανισοτροπίας ανταλλαγής λαμβάνουν χώρα σε τεχνικές στον τομέα των αισθητήρων. Η εφαρμογή τους αυτή αποτελεί έναυσμα για περαιτέρω μελέτη του πολύπλοκου αυτού φαινομένου.

4.4. Ενέργεια εξωτερικού πεδίου (Zeeman)

Η ενέργεια του μαγνητικού πεδίου μπορεί να χωριστεί σε δύο μέρη, την ενέργεια εξωτερικού πεδίου (Zeeman) και την ενέργεια ελεύθερου πεδίου (stray field). Το πρώτο μέρος αφορά την ενέργεια αλληλεπίδρασης του διανύσματος της μαγνήτισης με το εξωτερικό πεδίο και έχει τη μορφή:

$$E_H = -J_s \int \mathbf{H}_{ex} \cdot \mathbf{m} dV \quad (20)$$

Για ένα ομοιόμορφο εξωτερικό πεδίο, η ενέργεια εξαρτάται μόνο από τη μέση μαγνήτιση και όχι από μια συγκεκριμένη δομή ή κάποιο σχήμα του μέσου.

4.5. Ενέργεια ελεύθερου πεδίου

Γενική εξίσωση

Το δεύτερο μέρος της ενέργειας του μαγνητικού πεδίου συνδέεται με το μαγνητικό πεδίο που παράγεται από το ίδιο το μαγνητικό υλικό. Ξεκινώντας από την εξίσωση του Maxwell, $\nabla B = \nabla(\mu_0 \mathbf{H} + \mathbf{J})$, το ελεύθερο πεδίο H_d ορίζεται ως το πεδίο που παράγεται από την παράγωγο της μαγνήτισης \mathbf{J} :

$$\nabla H_d = -\nabla(J/\mu_0) \quad (21)$$

Οι δεξαμενές και οι πηγές της μαγνήτισης δρουν ως θετικά και αρνητικά «μαγνητικά φορτία» για το ελεύθερο πεδίο. Το πεδίο μπορεί να υπολογιστεί όπως υπολογίζεται το ηλεκτροστατικό πεδίο που παράγεται από τα ηλεκτρικά φορτία. Η μόνη διαφορά είναι ότι τα μαγνητικά φορτία δεν εμφανίζονται απομονωμένα αλλά εξισορροποούνται πάντα από τα αντίθετα φορτία τους. Η ενέργεια που σχετίζεται με το ελεύθερο πεδίο είναι:

$$E_d = \frac{1}{2} \mu_0 \int \mathbf{H}_d^2 dV = -\frac{1}{2} \int \mathbf{H}_d \cdot \mathbf{J} dV \quad (22)$$

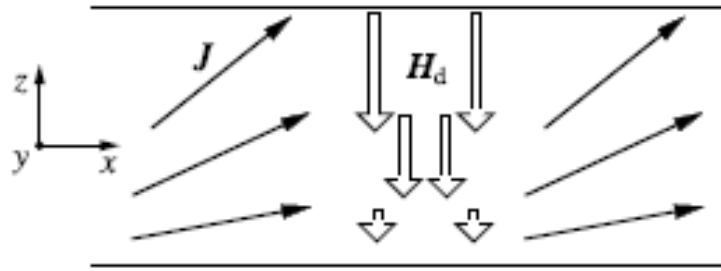
Το πρώτο ολοκλήρωμα εκτείνεται σε όλο το χώρο. Το γεγονός αυτό δείχνει ότι η ενέργεια ελεύθερου πεδίου είναι πάντα θετική, και μηδενίζεται όταν το ελεύθερο πεδίο είναι μηδέν παντού. Το δεύτερο ολοκλήρωμα είναι μαθηματικά ισοδύναμο με ένα πεπερασμένο δείγμα. Είναι συχνά ευκολότερος ο υπολογισμός του δεύτερου ολοκληρώματος καθώς εκτείνεται μόνο στο χώρο του μαγνητικού δείγματος. Οι παραπάνω εξισώσεις ορίζουν πλήρως την ενέργεια του ελεύθερου πεδίου.

Μια γενική λύση του προβλήματος του ελεύθερου πεδίου δίνεται από τη θεωρία δυναμικού. Η μειωμένη πυκνότητα χωρικού φορτίου λ_v και η επιφανειακή πυκνότητα φορτίου σ_s , ορίζονται, με βάση τη μειωμένη μαγνήτιση $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{J}(\mathbf{r})/J_s$:

$$\lambda_v = -\nabla \cdot \mathbf{m}, \quad \sigma_s = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} \quad (23)$$

Όπου \mathbf{n} είναι το διάνυσμα κάθετο στην επιφάνεια με φορά προς τα έξω. Αν το μέσο περιέχει διεπαφές μεταξύ δύο μέσων με διαφορετικές μαγνητίσεις \mathbf{m}_1 και \mathbf{m}_2 , τότε το επιφανειακό φορτίο γίνεται $\sigma_s = (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) \cdot \mathbf{n}$. Τα επιφανειακά φορτία της παραπάνω

εξίσωσης είναι μια ιδιαίτερη περίπτωση φορτίων διεπαφής όπου το δεύτερο μέσο είναι μη μαγνητικό.



Εικόνα 18. Ελεύθερο πεδίο σε μια κατανομή μαγνήτισης μιας διάστασης. Η εικόνα δείχνει την εγκάρσια τομή ενός επιπέδου (x,y) το οποίο εκτείνεται απείρως. Σε ένα τέτοιο πεδίο, το ελεύθερο πεδίο είναι μηδέν.

Με βάση τις παραπάνω εξισώσεις, το δυναμικό του ελεύθερου πεδίου στη θέση \mathbf{r} , δίνεται από ένα ολοκλήρωμα πάνω στο \mathbf{r} :

$$\Phi_d(\mathbf{r}) = \frac{J_s}{4\pi\mu_0} \left[\int \frac{\lambda_v(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' + \int \frac{\sigma_s(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dS' \right] \quad (24)$$

Από την εξίσωση αυτή, το ελεύθερο πεδίο μπορεί να προκύψει μέσω της σχέσης $\vec{H}_d(\mathbf{r}) = -\vec{\nabla}\Phi_d(\mathbf{r})$. Με μια ακόμα ολοκλήρωση, καταλήγουμε στην ενέργεια ελεύθερου πεδίου:

$$E_d = \frac{1}{2}J_s \left[\int \lambda_v(\mathbf{r})\Phi_d(\mathbf{r})dV + \int \sigma_s(\mathbf{r})\Phi_d(\mathbf{r})dS \right] \quad (25)$$

Τα ολοκληρώματα $\int dV$ και $\int dV'$ εκτείνονται σε όλο το δείγμα και τα ολοκληρώματα $\int dS$ και $\int dS'$ εκτείνονται σε όλη την επιφάνεια. Συνεπώς, ο υπολογισμός της ενέργειας ελεύθερου πεδίου γίνεται μέσω ενός εξαπλού ολοκληρώματος, στην περίπτωση όπου υπάρχει παρουσία χωρικού φορτίου. Παρόλο που το ολοκλήρωμα αποκλίνει για $\mathbf{r}=\mathbf{r}'$, το ολοκλήρωμα παραμένει πεπερασμένο.

Απλές περιπτώσεις υπολογισμού

Σε μερικές περιπτώσεις, ο υπολογισμός του ελεύθερου πεδίου δεν παρουσιάζει κάποια ιδιαίτερη δυσκολία. Ένα παράδειγμα είναι ένα απείρως εκτεινόμενο επίπεδο στο οποίο η κατεύθυνση της μαγνήτισης εξαρτάται μόνο από τον άξονα z . Στη μονοδιάστατη αυτή περίπτωση, η διαφορική εξίσωση παραγωγίζεται άμεσα, δίνοντας το ελεύθερο πεδίο, ή αλλιώς το πεδίο απομαγνήτισης \vec{H}_d , και την πυκνότητα ενέργειας του E_d :

$$H_d = -(J_s/\mu_0)m_3(z)\hat{e}_3 \quad (26)$$

$$E_d = -\frac{1}{2}\mathbf{H}_d \cdot \mathbf{J} = (J_s^2/2\mu_0)m_3^2(z) \quad (27)$$

Η πυκνότητα ενέργειας E_d έχει τη μορφή της ενέργειας ανισοτροπίας. Είναι σκόπιμο να ορισθεί μια συντομογραφία για το συντελεστή της εξίσωσης αυτής

$$K_d = (J_s^2/2\mu_0) \quad (28)$$

Η ενέργεια ελεύθερου πεδίου ισούται απλά με K_d σε ένα επίπεδο ομοιόμορφα μαγνητισμένο κάθετα στην επιφάνεια του. Καθώς αυτή η κατάσταση δεν είναι προτιμητέα, η ποσότητα K_d είναι ένα μέτρο για τη μέγιστη ενεργειακή πυκνότητα η οποία συνδέεται με τα ελεύθερα πεδία [35]. Ακόμα και σε περιπτώσεις όπου η ενέργεια ελεύθερου πεδίου είναι περίπλοκο να υπολογιστεί, θα απλοποιηθεί με βάση την παράμετρο K_d του υλικού.

Γενικά χαρακτηριστικά και αριθμητικοί υπολογισμοί

Παρά τις απλές περιπτώσεις, όπως αυτή που αναφέρθηκε προηγουμένως, ο υπολογισμός του ελεύθερου πεδίου είναι συνήθως πολύπλοκος και απαιτεί αριθμητικό υπολογισμό. Το πρόβλημα είναι ότι σε έναν αριθμητικό υπολογισμό, το εξαπλό ολοκλήρωμα του δυναμικού, θα ήταν απαγορευτικά χρονοβόρο.

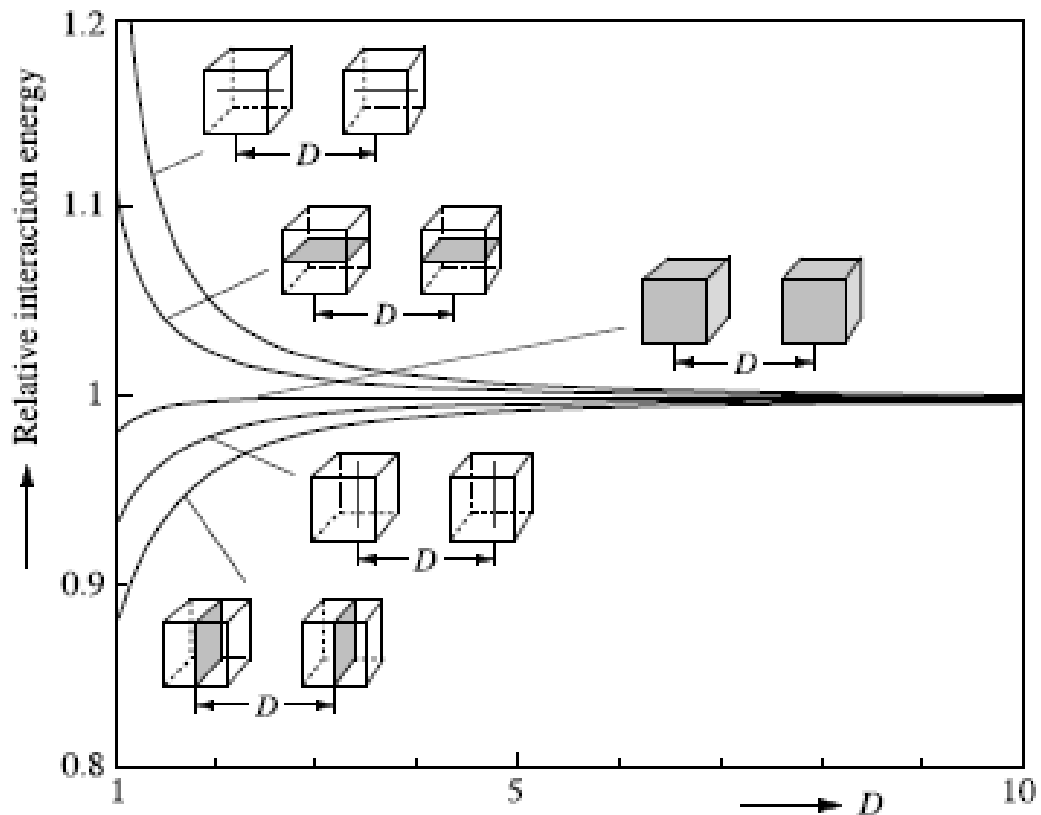
Παρακάτω παρουσιάζονται κάποιες παρατηρήσεις και τεχνικές οι οποίες θα ήταν χρήσιμες στην περίπτωση πολύπλοκου υπολογισμού του ελεύθερου πεδίου και της ενεργειακής του πυκνότητας.

- Η ενέργεια ελεύθερου πεδίου μπορεί να εκφραστεί με έναν ιδιαίτερα βολικό τρόπο, στην περίπτωση όπου αποτελεί κελί ενός περιοδικού πλέγματος. Έστω n κελιά, με κατευθύνσεις (a, b, c), θέσεις r και πυκνότητα φορτίου λ_i . Η ολική ελεύθερη ενέργεια μπορεί να γραφεί ως όροι ενός πίνακα αλληλεπίδρασης W :

$$E_d = \frac{1}{2\pi} K_d \sum_{i=1}^n \lambda_i \sum_{j=1}^n \lambda_j W_{ij} \quad (29)$$

Αξίζει να σημειωθεί ότι ο πίνακας αλληλεπίδρασης εξαρτάται μόνο από την απόσταση μεταξύ των κελιών, και όχι από την απόλυτη θέση τους, συνεπώς είναι ιδιαίτερα «οικονομικός», όσον αφορά τη υπολογιστική μνήμη και ώρα που απαιτείται για τον υπολογισμό του.

- Η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ απομακρυσμένων στοιχείων μπορεί να υπολογιστεί αντικαθιστώντας χωρικά ή επιφανειακά φορτία με γραμμικά ή σημειακά φορτία. Τελικά, οι υπολογισμοί βασιζόμενοι σε σημειακά φορτία θα είναι πιο ακριβείς για μακρινές αποστάσεις σε σχέση με τις αυστηρές εκφράσεις των χωρικών φορτίων, οι οποίες αποτελούνται από παραγωγίσεις μεγάλων αριθμών. Για να απεικονιστεί η σύγκλιση μεταξύ των διαφορετικών προσεγγίσεων, η παρακάτω εικόνα δείχνει την αλληλεπίδραση μεταξύ δύο στοιχείων ως συνάρτηση της απόστασης τους. Μαζί παρουσιάζονται και οι αντίστοιχες εκφράσεις ενός επίπεδου, γραμμικού και σημειακού φορτίου, τοποθετημένα στο κέντρο κάθε στοιχείου, με ακριβώς ίσο συνολικό φορτίο.



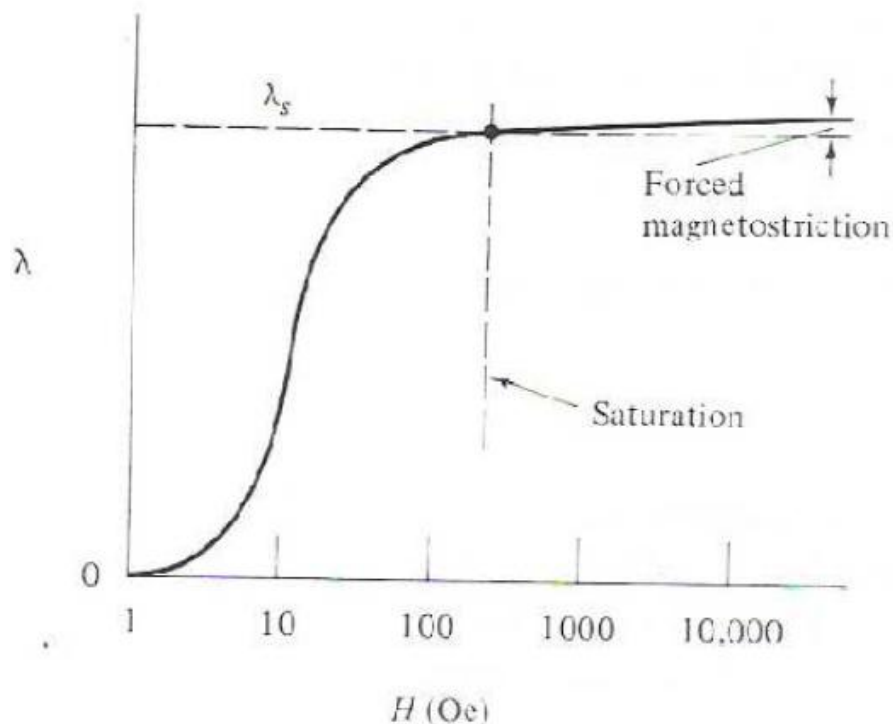
Εικόνα 19. Η ενέργεια αλληλεπίδρασης δύο μοναδιαίων κύβων ως συνάρτηση της απόστασης τους D , μαζί με τις αντίστοιχες ενός επίπεδου, γραμμικού και σημειακού φορτίου.

4.6. Μαγνητοελαστικές αλληλεπιδράσεις και μαγνητοσυστολή

Μέχρι το σημείο αυτό έχει γίνει αναφορά του μαγνητικού διανύσματος που περιγράφει ένα μαγνητικό σώμα. Τα ελαστικά αποτελέσματα εισάγουν ένα νέο βαθμό ελευθερίας. Ένα μαγνητικό σώμα παραμορφώνεται υπό την επίδραση μιας μαγνητικής αλληλεπίδρασης, και η παραμόρφωση αυτή, σε γενικές γραμμές, περιγράφεται από έναν ασύμμετρο τανυστή ελαστικής παραμόρφωσης $\mathbf{p}(r)$.

Όταν ένας κρύσταλλος βρεθεί μέσα σε ένα μαγνητικό που είναι παράλληλο προς την εύκολη διεύθυνση του, τότε επιμηκύνεται σε αυτή τη διεύθυνση και συστέλλεται στις κάθετες διευθύνσεις [36]. Η μία κίνηση αντιτίθεται στην κίνηση της άλλης και έτσι προκαλούνται ελαστικές τάσεις στο υλικό οι οποίες είναι ανάλογες του όγκου των περιοχών που συστέλλονται.

Η διαμήκης επιμήκυνση $\Delta l/l$ παράλληλα προς τη διεύθυνση της μαγνήτισης ονομάζεται σταθερά μαγνητοσυστολής, και συμβολίζεται με λ . Η σταθερά μαγνητοσυστολής εξαρτάται από την κρυσταλλική διεύθυνση και μπορεί να είναι θετική (επιμήκυνση) ή αρνητική (συστολή). Όταν η μαγνήτιση είναι παράλληλα σε μια από τις εύκολες διευθύνσεις, τότε η σταθερά λ είναι πάντοτε θετική.



Εικόνα 20. Μεταβολή της μαγνητοσυστολής σε σχέση με το πεδίο H .

Το μέγεθος της μαγνητοσυστολής αυξάνεται με το πεδίο, και η τιμή όταν $M=M_s$ είναι η μαγνητοσυστολή κόρου λ_s που είναι ωστόσο μικρή της τάξης 10^{-5} . Ο συνολικός όγκος του δείγματος παραμένει σταθερός, επομένως η μαγνητοσυστολή στις δύο εγκάρσιες κατευθύνσεις είναι

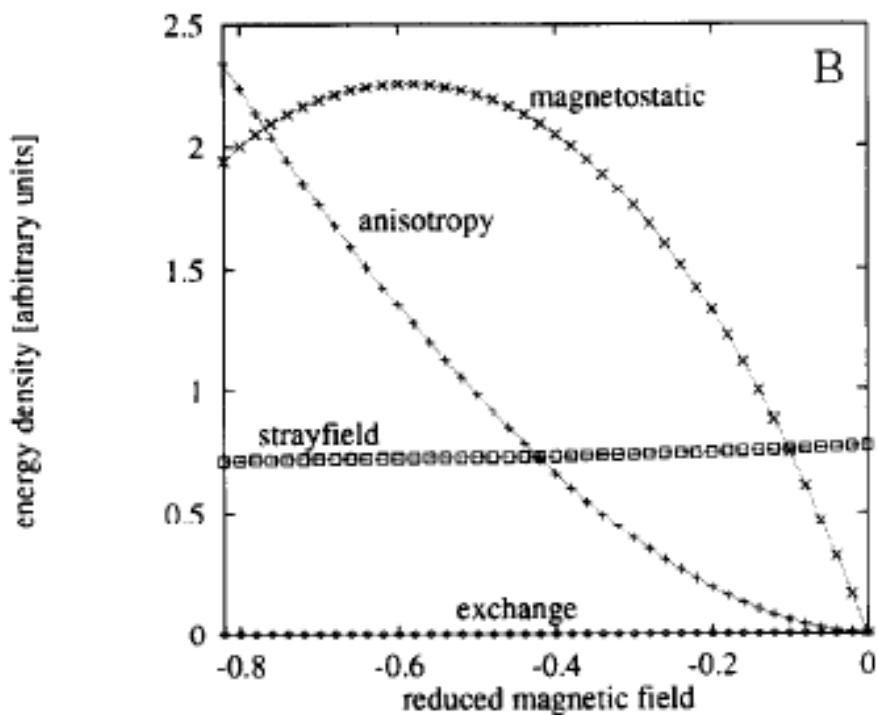
$$\lambda_t = -\frac{\lambda}{2} \quad (30)$$

Η παραμόρφωση αποτελείται από ένα συμμετρικό κομμάτι, τον τανυστή ελαστικής τάσης ϵ , και ένα αντισυμμετρικό μέρος, τον τανυστή περιστροφής πλέγματος ω . Κατά μια προσέγγιση, όλα τα μέρη της ελεύθερης ενέργειας μπορούν να αναλυθούν με βάση το $\rho(r)$. Καθώς τα μαγνητοελαστικά φαινόμενα είναι ασθενή στο σιδηρομαγνητισμό, οι αναλύσεις αυτές πρέπει να περιλαμβάνουν μόνο έναν όρο χαμηλής τάξης. Παρόλα αυτά επηρεάζουν τη δομή των μαγνητικών περιοχών.

Τα στοιχεία μηδενικής τάξης περιγράφουν την ενέργεια του μη παραμορφωμένου πλέγματος. Τα στοιχεία πρώτης τάξης καθορίζουν την μαγνητοελαστική ενέργεια αλληλεπίδρασης, ενώ οι όροι δεύτερης τάξης περιγράφουν την ελαστική ενέργεια, η οποία συνήθως θεωρείται ανεξάρτητη της κατεύθυνσης μαγνήτισης.

Η απόρριψη όρων τρίτης τάξης της ελαστικής πίεσης σημαίνει γραμμική ελαστικότητα η οποία χαρακτηρίζεται από τον νόμο του Hooke. Αυτή είναι σίγουρα μια καλή προσέγγιση για φαινόμενα μαγνητοσυστολής, που ασχολούνται με μαγνήτιση που προκαλείται από τάσεις της τάξης 10^{-6} έως 10^{-3} μόνο. Αν υπάρξει υπέρθεση ισχυρότερων παραμορφώσεων μη μαγνητικής προέλευσης, πρέπει κανείς να εξετάσει το φαινόμενο χρησιμοποιώντας τις αντίστοιχες γραμμικές ελαστικές σταθερές. Η διαχείριση λοιπόν, μαγνητοελαστικών φαινομένων στο πλαίσιο της γραμμικής ελαστικότητας και των μαγνητοελαστικών συντελεστών οι οποίοι είναι ανεξάρτητοι της πίεσης, είναι συνήθως επαρκής.

Τέλος, για την καλύτερη κατανόηση της συνεισφοράς και της σημαντικότητας του κάθε όρου της ενέργειας, παρουσιάζεται η παρακάτω εικόνα. Στην εικόνα αυτή, φαίνονται οι όροι της μαγνητοστατικής ενέργειας, της ενέργειας ελεύθερου πεδίου, ενέργειας ανισοτροπίας και ανταλλαγής. Απεικονίζεται η μεταβολή των όρων αυτών σε σχέση με το εξωτερικό πεδίο το οποίο μειώνεται συνεχώς, για έναν απομονωμένο κόκκο ενός υλικού.



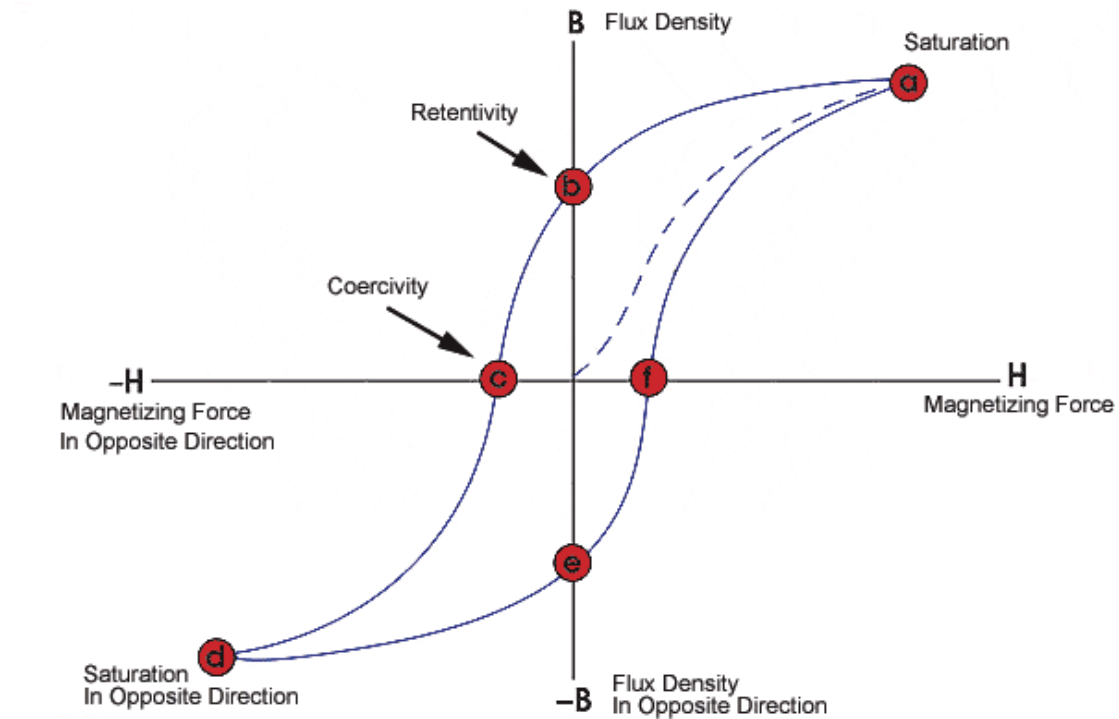
Εικόνα 21. Συνεισφορές της ενέργειας κατά μήκος της αντίστροφης διαδικασίας της μαγνητικής καμπύλης, ως συνάρτηση του μειωμένου μαγνητικού πεδίου.

5. Βρόχος υστέρησης

5.1. Μαγνητική Υστέρηση

Οι μακροσκοπικές μαγνητικές ιδιότητες μπορούν εύκολα να αναπαρασταθούν με την χάραξη του διαγράμματος της μαγνητικής επαγωγής \mathbf{B} συναρτήσει του εξωτερικά εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου \mathbf{H} που αποτελεί την καμπύλη του βρόχου υστέρησης. Εναλλακτικά είναι δυνατή η χάραξη του αντίστοιχου διαγράμματος μαγνήτισης, από το οποίο όμως λαμβάνονται οι ίδιες πληροφορίες.

Ένας τυπικός βρόχος υστέρησης φαίνεται στην Εικόνα 22. Ένας τυπικός βρόχος υστέρησης παρέχει όλες τις απαραίτητες πληροφορίες οι οποίες μπορούν να καθορίσουν αν κάποιο σιδηρομαγνητικό υλικό είναι κατάλληλο για μια δεδομένη εφαρμογή ή όχι.



Εικόνα 22. Καμπύλη βρόχου υστέρησης σιδηρομαγνητικού υλικού.

Ένα σιδηρομαγνητικό υλικό το οποίο δεν έχει ποτέ πριν μαγνητιστεί, ή που έχει απομαγνητιστεί πλήρως, ακολουθεί αρχικά την διακεκομμένη γραμμή της παραπάνω εικόνας, καθώς το εξωτερικό πεδίο αρχίζει να αυξάνεται. Είναι προφανές, ότι για ένα μεγάλο γενικά εύρος τιμών του H , το B συνεχίζει διαρκώς να αυξάνεται. Φτάνοντας στο σημείο a , περαιτέρω αύξηση του μαγνητικού πεδίου επηρεάζει ανεπαίσθητα την επαγωγή. Σε αυτό το σημείο λέμε ότι το υλικό έχει φτάσει τη μαγνήτιση κορεσμού.

Στη συνέχεια, καθώς το H αρχίζει σταδιακά να ελαττώνεται η καμπύλη μετακινείται από το σημείο a στο b . Σε αυτό το σημείο, αν και το εξωτερικό πεδίο έχει μηδενιστεί, η πυκνότητα μαγνητικής ροής δεν είναι μηδέν. Το σημείο b παριστάνει την αντίσταση απομαγνήτισης (retentivity) του υλικού.

Στη συνέχεια, καθώς το πεδίο αρχίζει να λαμβάνει αρνητικές τιμές, δηλαδή να αυξάνεται με αντίστροφη πολικότητα, η μαγνητική επαγωγή ελαττώνεται, και στο σημείο c μηδενίζεται. Το σημείο αυτό δίνει πληροφορίες για το συνεκτικό πεδίο του υλικού, (coercivity). Καθώς το πεδίο εξακολουθεί να αυξάνεται αρνητικά, το υλικό θα φτάσει σε μαγνήτιση κόρου προς την αντίθετη φορά (σημείο d).

Στη συνέχεια, το εξωτερικό πεδίο ελαττώνεται και η καμπύλη περνάει από το σημείο e όπου αντιστοιχεί στην αντίσταση απομαγνήτισης της αντίστροφης φοράς. Παρατηρούμε ότι καθώς συνεχίζουμε να αυξάνουμε το H , η καμπύλη δεν θα περάσει ξανά από την αρχή των αξόνων, αλλά από το σημείο f , λόγω της παραμένουσας μαγνήτισης (remanence). Σε αυτό το σημείο, μπορούμε να κατανοήσουμε τη σημασία

των μεγεθών μ και χ τα οποία ορίσαμε αρχικά, τα οποία αντιστοιχούν στην κλίση της διακεκομμένης καμπύλης κοντά στην αρχή των αξόνων.

5.2. Μαγνήτιση κορεσμού

Από το βρόχο υστέρησης φαίνεται ότι το σιδηρομαγνητικό υλικό είναι αρχικά αμαγνήτιστο. Με εφαρμογή ενός εξωτερικά εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου H , προκαλείται η αύξηση της μαγνητικής επαγωγής B προς την διεύθυνση του πεδίου. Καθώς αυξάνεται το μαγνητικό πεδίο H , η μαγνήτιση θα φτάσει τελικά σε μια τιμή M_0 . Η τιμή αυτή απεικονίζει την κατάσταση στην οποία όλες οι μαγνητικές ροπές μέσα στον όγκο του υλικού είναι ευθυγραμμισμένες παράλληλα με το εξωτερικά επιβαλλόμενο μαγνητικό πεδίο H και ονομάζεται μαγνήτιση κορεσμού.

Η μαγνήτιση κορεσμού εξαρτάται από το μέγεθος της ατομικής μαγνητικής διπολικής ροπής του υλικού και από τον αριθμό των ατόμων ανά μονάδα όγκου με βάση την επόμενη σχέση:

$$M_0 = nm \quad (31)$$

Το M_0 εξαρτάται μόνο από το υλικό και από τη μικροδομή του.

5.3. Συνεκτικό πεδίο

Για την επαναφορά ενός μαγνητισμένου σιδηρομαγνήτη σε κατάσταση πλήρους απομαγνήτισης είναι απαραίτητη η εφαρμογή ενός αντίστροφου εξωτερικά εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου έντασης \vec{Hc} . Το πεδίο αυτό ονομάζεται συνεκτικό πεδίο (coercive field) και αντιστοιχεί στις τιμές του H στα σημεία c και f της καμπύλης υστέρησης.

6. Θόρυβος Barkhausen

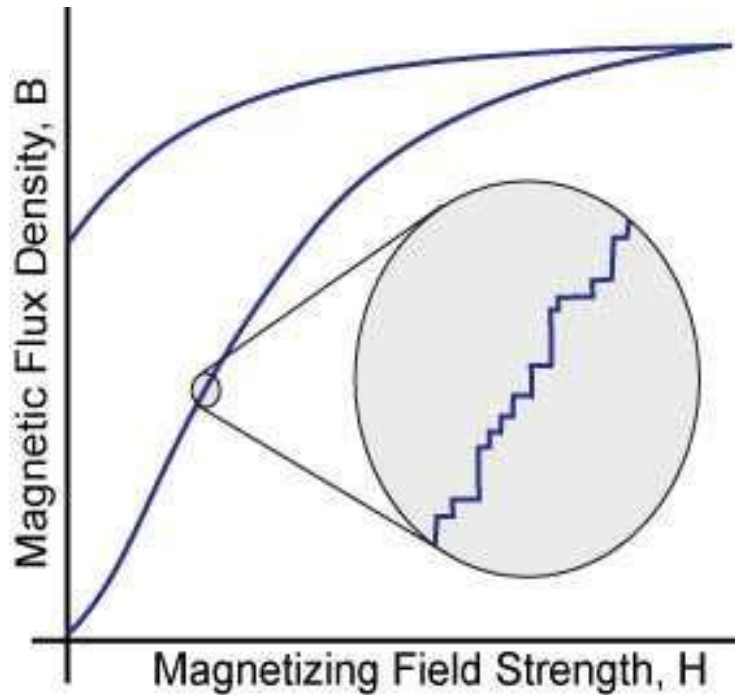
Σύμφωνα με το φαινόμενο Barkhausen, ενώ το εξωτερικά επιβαλλόμενο, μαγνητικό πεδίο μεταβάλλεται με συνεχή τρόπο συναρτήσει του χρόνου, παρατηρείται ασυνεχής μετάβαση στην πυκνότητα μαγνητικής ροής στο εσωτερικό των σιδηρομαγνητικών υλικών.

Η αρχική παρατήρηση του φαινομένου έγινε όταν ένα πηνίο λήψης τυλιγμένο γύρω από ένα δείγμα σιδήρου συνδέθηκε με ενισχυτή και ηχείο. Καθώς το πεδίο H

αυξανόταν ομοιόμορφα, το ηχείο παράγαγε μια σειρά ασθενών ήχων, τα οποία οφείλονταν σε μικρού πλάτους παλμούς που επάγονταν στο σημείο λήψης.

Αρχικά, το φαινόμενο αποδόθηκε στην αιφνίδια περιστροφή της μαγνήτισης μιας περιοχής από ένα κύριο άξονα σε ένα άλλο κύριο άξονα, πλησιέστερο στη διεύθυνση του εξωτερικά επιβαλλόμενου μαγνητικού πεδίου. Σήμερα, είναι γνωστό ότι κίνηση των μαγνητικών τοιχωμάτων είναι ο σημαντικότερος παράγοντας που προκαλεί το θόρυβο Barkhausen, μολονότι και οι δύο μηχανισμοί είναι υπαρκτοί και συμβάλλουν στο φαινόμενο.

Από τα είδη των μαγνητικών τοιχωμάτων, εκείνα στα οποία οφείλεται ο θόρυβος Barkhausen περισσότερο είναι τα τοιχώματα 180° . Τα τοιχώματα 90° είναι λιγότερο ευκίνητα καθώς συνδέονται με πεδία τάσεων και η κίνηση τους παρεμποδίζεται περισσότερο. Κάθε απότομο άλμα στη μετακίνηση των τοιχωμάτων, αυξανόμενου του μαγνητικού πεδίου, προκαλεί ένα παλμό εξόδου. Το σύνολο των παλμών αποτελεί το θόρυβο Barkhausen.



Εικόνα 23. Ασυνέχειες Barkhausen κατά μήκος μιας καμπύλης μαγνήτισης.

Ο θόρυβος εμφανίζεται στα σημεία του βρόχου υστέρησης όπου η κλίση είναι μεγάλη καθώς η κλίση του διαγράμματος του βρόχου υστέρησης αποτελεί τη διαφορική μαγνητική διαπερατότητα του υλικού. Όλες οι ανομοιογένειες του κρυσταλλικού πλέγματος μπορούν να αποτελέσουν σημεία αγκύρωσης και κατ' επέκταση είναι υπεύθυνα για την πρόκληση μαγνητικής εκπομπής θορύβου Barkhausen. Αυτές, όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, μπορεί να είναι σημειακές ατέλειες, εγκλείσματα, διαταραχές, κατακρημνίσματα, παραμένουσες τάσεις ή ακόμη και τα όρια κόκκων.

Γενικά, η αύξηση των ατελειών του κρυσταλλικού πλέγματος επιφέρει αύξηση της μαγνητικής απόκρισης του θορύβου Barkhausen, αφού τα τοιχώματα συναντούν

περισσότερα εμπόδια στην κίνησή τους. Επίσης, αύξηση του μαγνητικού θορύβου Barkhausen επιφέρει η ύπαρξη εφελκυστικών τάσεων παράλληλα στον άξονα μαγνήτισης, ενώ το αντίθετο αποτέλεσμα έχει η ύπαρξη θλιπτικών τάσεων παράλληλα στον άξονα μαγνήτισης.

Τέλος, ο θόρυβος Barkhausen έχει ανάλογη σχέση με το μέγεθος κόκκου. Έτσι όσο πιο λεπτοκρυσταλλικό είναι ένα υλικό, τόσο υψηλότερη απόκριση εμφανίζει. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι τα όρια των κόκκων είναι τοποθεσίες που ευνοούν την αγκύρωση των μαγνητικών τοιχωμάτων.

7. Αριθμητικές Μέθοδοι Υπολογισμού

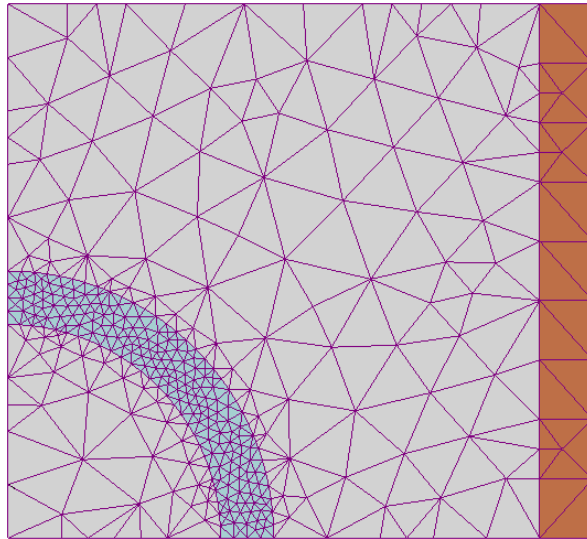
Η συσχέτιση μεταξύ μαγνητικών ιδιοτήτων και μικροδομής, σε γενικά πλαίσια, είναι αρκετά περίπλοκη και δεν μπορεί να διαχειριστεί αποκλειστικά με τη θεωρία του μικρομαγνητισμού. Αντί αυτού, απαιτείται η εφαρμογή αριθμητικών μεθόδων.

Η πιο διαδεδομένη αριθμητική μέθοδος είναι η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων (finite element method - FEM). Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων είναι μια αριθμητική τεχνική για την εύρεση προσεγγιστικής λύσης σε προβλήματα συνοριακών τιμών με μερικές διαφορικές εξισώσεις [37]. Στηρίζεται στην υποδιαίρεση της περιοχής του προβλήματος σε μικρότερα και απλούστερα μέρη, τα λεγόμενα πεπερασμένα στοιχεία. Στη συνέχεια χρησιμοποιεί μεθόδους απειροστικού λογισμού για την επίλυση του προβλήματος, ελαχιστοποιώντας μια σχετική συνάρτηση σφάλματος.

Η ιδέα είναι ανάλογη της λογικής ότι συνδέοντας πολλά μικροσκοπικά ευθύγραμμα τμήματα μπορεί κανείς να προσομοιώσει έναν μεγάλο κύκλο [38]. Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων περιλαμβάνει μεθόδους για τη σύνδεση πολλών απλών στοιχειωδών εξισώσεων που αφορούν πολλές μικρές υποπεριοχές, για να προσεγγίσει μια περισσότερο πολύπλοκη εξίσωση μιας μεγάλης περιοχής.

Η υποδιαίρεση μιας περιοχής σε μικρότερες υποπεριοχές έχει αρκετά πλεονεκτήματα:

- Διασφαλίζει την ακριβή αναπαράσταση μιας περίπλοκης γεωμετρίας
- Εντάσσει ανόμοιες ιδιότητες των υλικών
- Παρέχει εύκολη αναπαράσταση της συνολικής λύσης
- Δεσμεύει οποιαδήποτε τοπικά αποτελέσματα



Εικόνα 24. Εικόνα πλέγματος μέσω της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων.

Μια τυπική διαδικασία της μεθόδου περιλαμβάνει δύο μέρη. Αρχικά, το πρώτο μέρος, περιλαμβάνει την υποδιαίρεση της περιοχής του προβλήματος σε υποπεριοχές, κάθε μία από τις οποίες αντιπροσωπεύεται από ένα σύνολο στοιχειωδών εξισώσεων του αρχικού προβλήματος. Στη συνέχεια, ακολουθείται από έναν συστηματικό συνδυασμό όλων των συνόλων αυτών, σε ένα συνολικό σύστημα εξισώσεων για τον τελικό υπολογισμό. Το συνολικό σύστημα εξισώσεων έχει γνωστές λύσεις, και μπορεί να υπολογιστεί από τις αρχικές συνθήκες του προβλήματος, δίνοντας ένα τελικό αριθμητικό αποτέλεσμα.

Πολλές έρευνες έχουν δημοσιευθεί, οι οποίες υποστηρίζουν και επιδεικνύουν τη δύναμη της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων [39, 40], και την αναφέρουν ως μια αξιόπιστη και ρεαλιστική μέθοδο [41, 42]. Παρόλα αυτά, το γεγονός ότι απαιτείται να οριστεί μια συγκεκριμένη δομή και συνοριακές συνθήκες για κάθε δομή του στοιχείου που εξετάζεται, καθιστά την μέθοδο αυτή πολύπλοκη, και σε αρκετές περιπτώσεις δύσχρηστη.

Για το λόγο αυτό, πολλές φορές προτιμάται η αναπαράσταση της δομής που μελετάται σε μια απλούστερη μορφή. Σε μια τέτοια περίπτωση, το υλικό και οι ιδιότητές του προσομοιάζονται ικανοποιητικά, χωρίς την απαίτηση συγκεκριμένης δομής και συνοριακών συνθηκών.

8. Γλώσσα Προγραμματισμού MATLAB

Το MATLAB είναι ένα περιβάλλον αριθμητικής υπολογιστικής και μια προγραμματιστική γλώσσα τέταρτης γενιάς. Χρησιμοποιείται κατά κύριο λόγο για την

επίλυση μαθηματικών προβλημάτων, ωστόσο είναι πολύ "ισχυρό" και μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για προγραμματισμό. Στον τομέα των γραφικών, όσον αφορά το μαθηματικό κλάδο, μπορεί να υλοποιήσει συναρτήσεις πραγματικές, μιγαδικές, πεπλεγμένες συναρτήσεις δύο μεταβλητών και άλλες.

Πιο συγκεκριμένα, η χρήση του MATLAB προσφέρει, εκτός από ένα ολοκληρωμένο περιβάλλον ανάπτυξης, και τα ακόλουθα πλεονεκτήματα.

- Τα περισσότερα υπολογιστικά προγράμματα εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από τη χρήση πολλών βρόχων προκειμένου να επιτευχθεί ο υπολογισμός αθροισμάτων ή να υλοποιηθεί στον Η/Υ μια επαναληπτική μέθοδος. Συχνά, ο αλγόριθμος που πρέπει να υλοποιηθεί περιέχει βρόχους με την ίδια ουσιαστικά δομή με μοναδικό αποτέλεσμα την πολύπλοκη γραφή του κώδικα. Ενώ σε άλλες γλώσσες προγραμματισμού, κάθε μεταβλητή αναπαριστά μία μόνο αριθμητική τιμή, στο MATLAB αναπαριστά έναν πίνακα αριθμών και οι στοιχειώδεις αριθμητικές πράξεις γενικεύονται έτσι ώστε να εφαρμόζονται εύκολα στην αριθμητική των πινάκων. Αυτή η "διανυσματικοποίηση" των πράξεων έχει ως αποτέλεσμα την ταχύτερη εκτέλεση τους και έναν τρόπο γραφής του κώδικα απλούστερο από άποψη δομής και εμφάνισης.

- Σε πολλά προβλήματα ο προγραμματιστής χρειάζεται να έχει στη διάθεσή του έτοιμες ρουτίνες προκειμένου να ελαχιστοποιήσει το χρόνο παραγωγής κώδικα. Για αυτό το λόγο το MATLAB περιλαμβάνει μια πλούσια συλλογή από έτοιμες συναρτήσεις τις οποίες ο χρήστης μπορεί εύκολα να καλεί. Στις περισσότερες από αυτές ο κώδικας είναι ανοικτός στο χρήστη για οποιαδήποτε αλλαγή και τροποποίηση.

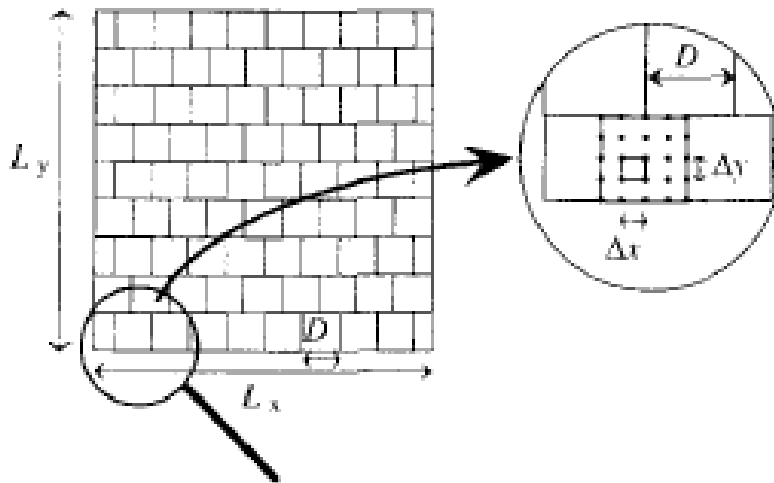
- Συχνά ο καλύτερος τρόπος για την κατανόηση ενός προβλήματος είναι η γραφική αναπαράσταση των δεδομένων του. Ενώ οι άλλες γλώσσες προγραμματισμού δεν παρέχουν ένα φιλικό, στο χρήστη, τρόπο γραφικής αναπαράστασης, το εντυπωσιακότερο ίσως χαρακτηριστικό του MATLAB είναι η ευκολία στη δημιουργία και το χειρισμό των διδιάστατων (2D) και τρισδιάστατων (3D) γραφικών.

Μέθοδος Προσομοίωσης

1. Δομή του υλικού

Ο μικρομαγνητισμός είναι μια συνεχής θεωρία της μαγνητικής δομής σε μαγνητικά υλικά, των οποίων το χαρακτηριστικό είναι η ένταξη της μακροσκοπικής μαγνήτισης $M(\mathbf{x})$ ως στοιχείο της ελεύθερης ενέργειας. Σε στατικές καταστάσεις, οι οποίες μελετώνται στην παρούσα εργασία, το πεδίο της μαγνήτισης καθορίζεται από την ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας.

Αρχικά θεωρούμε μια κατανομή δύο διαστάσεων $M \times N$ κελιών, όπου κάθε κελί αναπαριστά ένα ατομικό δίπολο. Σκοπός της δομής αυτής, είναι να προσεγγιστεί η συμπεριφορά μιας μαγνητικής περιοχής. Η διδιάστατη μαγνητική δομή διαστάσεων L_x και L_y έχει διαιρεθεί σε περιοχές, όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα. Οι διαστάσεις των κελιών είναι Δx και Δy , αντίστοιχα.



Εικόνα 3. Σχεδιάγραμμα της διακριτοποιημένης περιοχής διαστάσεων L_x και L_y , και η διαίρεση τους σε κελιά.

2. Υπολογισμός ολικής ενέργειας

Η ολική μαγνήτιση του υλικού είναι το άθροισμα της επιμέρους μαγνήτισης του κάθε κελιού i, j . Η μαγνήτιση του κάθε κελιού δίνεται από το γινόμενο του μέτρου της μαγνήτισης, το οποίο είναι σταθερό, με το συνημίτονο της γωνίας φ που σχηματίζει, για

κάθε κελί, το διάνυσμα της μαγνήτισης με τον εύκολο άξονα διεύθυνσης του υλικού. Η ολική μαγνήτιση λοιπόν, δίνεται από τη σχέση:

$$M = \sum_{i,j}^{M,N} M_{max} \cos \varphi_{i,j} \quad (1)$$

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η ολική ενέργεια αποτελείται από επιμέρους ενεργειακούς όρους. Ο υπολογισμός της ολικής ενέργειας έγινε λαμβάνοντας υπόψη τον όρο της ενέργειας ανισοτροπίας, της ενέργειας εξωτερικού πεδίου και της ενέργειας ελεύθερου πεδίου, ή αλλιώς, ενέργειας μέσου πεδίου. Η ολική ενέργεια συνεπώς είναι:

$$E_{total} = E_K + E_H + E_M \quad (1)$$

Όπου,

E_K η ενέργεια ανισοτροπίας

E_H η ενέργεια εξωτερικού πεδίου

E_M η ενέργεια μέσου πεδίου

Κάθε όρος της ενέργειας περιγράφεται αναλυτικά παρακάτω.

➤ **Ενέργεια ανισοτροπίας E_K**

Η ενέργεια ανισοτροπίας E_K είναι αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης spin - τροχιάς και εξαρτάται από την κατεύθυνση μαγνήτισης του υλικού σε σχέση με τους εύκολους άξονες δόμησης του υλικού. Στη δομή που μελετάται, η ενέργεια ανισοτροπίας μπορεί να περιγραφεί από τη σχέση:

$$E_K = \sum_{i,j}^{M,N} K_1 [1 - (\hat{m}_{i,j} \cdot \hat{e})^2] \quad (3)$$

όπου το μοναδιαίο διάνυσμα \hat{e} περιγράφει τον εύκολο άξονα μαγνήτισης του υλικού και $\hat{m}_{i,j}$ είναι το διάνυσμα της μαγνήτισης του κάθε κελιού i,j . Επίσης, K_1 είναι η σταθερά ανισοτροπίας του υλικού. Αντικαθιστώντας τη μαγνήτιση με τη μορφή της εξίσωσης (2), η παραπάνω σχέση μετατρέπεται στην εξής μορφή:

$$E_K = \sum_{i,j}^{M,N} [K_1 (1 - M^2 \cos^2 \varphi_{i,j})] \quad (4)$$

Έχει αναφερθεί, πως σε σπάνιες περιπτώσεις, όπως αυτές των χαμηλών θερμοκρασιών, κρίνεται αναγκαίο να συμπεριληφθούν όροι τάξης υψηλότερης της δεύτερης στον όρο της ανισοτροπικής ενέργειας. Στην παρούσα εργασία μελετάται μια δομή δύο διαστάσεων, συνεπώς μπορεί να παραλειφθεί και ο όρος δεύτερης τάξης, καθώς η ενέργεια ανισοτροπίας περιγράφεται ικανοποιητικά μόνο από τον πρώτο όρο και τη σταθερά ανισοτροπίας K_1 .

➤ **Ενέργεια εξωτερικού πεδίου E_H**

Η ενέργεια εξωτερικού πεδίου δίνεται από την αλληλεπίδραση της μαγνήτισης του υλικού με το εξωτερικό εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο. Η γενική της εξίσωση είναι:

$$E_H = J_S \sum_{i,j}^{M,N} \hat{m}_{i,j} \cdot H^{ext} \quad (5)$$

Θεωρώντας ότι το εξωτερικό πεδίο H^{ext} σχηματίζει με τον εύκολο άξονα δόμησης του υλικού γωνία θ , τότε το εξωτερικό πεδίο μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$H_x = H \cos \theta \quad \text{και} \quad H_y = H \sin \theta \quad (6)$$

Με αυτά τα δεδομένα, ο όρος της ενέργειας εξωτερικού πεδίου ο οποίος χρησιμοποιείται στο άθροισμα της ενέργειας, δίνεται από τη σχέση:

$$E_H = J_S \sum_{i,j}^{M,N} M_{max} \cdot H \cos(\theta - \varphi_{i,j}) \quad (7)$$

➤ **Ενέργεια μέσου πεδίου E_M**

Η ενέργεια μέσου πεδίου συνδέεται με το μαγνητικό πεδίο που παράγει το ίδιο το μαγνητικό υλικό και θεωρείται ως όρος απομαγνήτισης του υλικού. Μια απλουστευμένη μορφή του είναι:

$$E_M = \frac{1}{2} \mu_0 \int \mathbf{H}_d^2 dV \quad (8)$$

Η μορφή αυτή όμως δημιουργεί προβλήματα υπολογισμού στην περίπτωση όπου δεν χρησιμοποιούνται μέθοδοι με οριακές συνθήκες στην επιφάνεια του υλικού. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιείται μια άλλη μορφή της ενέργειας απομαγνήτισης. Η μέθοδος αυτή είναι σημαντικά πιο χρονοβόρα και καταναλώνει περισσότερη υπολογιστική ισχύ, αλλά

προτιμάται καθώς προσομοιώνει πλήρως τους μη τοπικούς όρους της ενέργειας απομαγνήτισης.

Αρχικά, θεωρούμε μια σταθερή κατανομή χωρικού και επιφανειακού φορτίου σε όλο το χώρο του υλικού, η οποία δίνεται από τις σχέσεις:

$$\rho = \vec{\nabla} \cdot \vec{n} \quad \text{και} \quad \sigma = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} \quad (9)$$

όπου \mathbf{n} είναι το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στην επιφάνεια του υλικού με φορά προς την εξωτερική πλευρά της επιφάνειας.

Το βαθμωτό δυναμικό $\varphi(\mathbf{r})$ προέρχεται από την κατάλληλη συνάρτηση Green δύο διαστάσεων [13] και είναι της μορφής:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{J_s}{4\pi\mu_0} \left(\int \rho(\mathbf{r}') \ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| dS' - \int \sigma(\mathbf{r}') \ln|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| dL' \right) \quad (10)$$

Η ενέργεια μέσου πεδίου, ή αλλιώς, η ενέργεια απομαγνήτισης προκύπτει άμεσα από το παραπάνω δυναμικό και είναι:

$$E_M = \frac{J_s}{2} \left(\int \rho(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}) dS' - \int \sigma(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}) dL' \right) \quad (11)$$

Επιπλέον, το πεδίο απομαγνήτισης θα μπορούσε να προκύψει από την παράγωγο του δυναμικού $\vec{H}_D = -\vec{\nabla}\varphi$.

Για τον σωστό υπολογισμό των φορτίων και των συντελεστών αλληλεπίδρασης σε κάθε κελί χρησιμοποιείται διακριτοποιημένος φορμαλισμός. Τα φορτία των κελιών υπολογίζονται μέσω ενός μέσου όρου των συστατικών της μαγνήτισης. Επιπλέον, οι τιμές του δυναμικού αφορούν την επιφάνεια κάθε κελιού, καθώς επίσης και τα όρια των κελιών σε ολόκληρη την δομή του υλικού.

Το δυναμικό υπολογίζεται λαμβάνοντας υπόψη τα επιφανειακά και χωρικά φορτία και τους συντελεστές αλληλεπίδρασης. Ο υπολογισμός αυτός οδηγεί σε συντελεστές αλληλεπίδρασης κελιού – κελιού ($W_{κκ}$), και συντελεστές κελιού – επιφάνειας ($W_{κε}$), για το δυναμικό που αφορά το εσωτερικό των κελιών. Για τις τιμές του δυναμικού που αφορούν στις οριακές επιφάνειες, εμφανίζονται συντελεστές αλληλεπίδρασης κελιού – επιφάνειας ($W_{κε}$), και συντελεστές αλληλεπίδρασης επιφάνειας – επιφάνειας ($W_{εε}$). Οι τιμές των παραπάνω συντελεστών έχουν βρεθεί βιβλιογραφικά.

Με βάση τα παραπάνω, οι πιθανές τιμές του δυναμικού στο εσωτερικό του υλικού γράφονται ως εξής:

$$\begin{aligned} \varphi_{i,j}^{int} = & \sum_{k,l}^{M,N} \rho_{kl} W_{|i-k|,|j-l|}^{kk} + \sum_k^N (\sigma_k^{bot} W_{|i-k|,j-1}^{k\varepsilon} + \sigma_k^{top} W_{|i-k|,M-j}^{k\varepsilon}) \\ & + \sum_l^M (\sigma_l^{left} W_{|j-l|,i-1}^{k\varepsilon} + \sigma_l^{right} W_{|j-l|,N-i}^{k\varepsilon}) \end{aligned} \quad (12)$$

Στην κάτω πλευρά μιας περιοχής δύο διαστάσεων, το επιφανειακό δυναμικό έχει υπολογιστεί από τη σχέση:

$$\begin{aligned} \varphi_{i,j}^{bot} = & \sum_{k,l}^{M,N} \rho_{kl} W_{|i-k|,|l-1|}^{k\varepsilon} + \sum_k^N (\sigma_k^{bot} W_{|i-k|,0}^{\varepsilon\varepsilon} + \sigma_k^{top} W_{|i-k|,M}^{\varepsilon\varepsilon}) \\ & + \sum_l^M (\sigma_l^{left} W_{i-1,l-1}^{\varepsilon\varepsilon} + \sigma_l^{right} W_{N-i,l-1}^{\varepsilon\varepsilon}) \end{aligned} \quad (13)$$

Αντίστοιχες εκφράσεις του δυναμικού προκύπτουν και για τις υπόλοιπες πλευρές της δομής του υλικού, με τους αντίστοιχους συντελεστές αλληλεπίδρασης και τα αντίστοιχα επιφανειακά και χωρικά φορτία.

Τέλος, με βάση την εξίσωση (11) για την ενέργεια μέσου πεδίου, και με το δυναμικό που δίνεται από τις παραπάνω σχέσεις, προκύπτει η τελική μορφή της ενέργειας μέσου πεδίου, ή αλλιώς, της ενέργειας απομαγνήτισης:

$$\begin{aligned} E_M = & \frac{J_s^2}{4\pi\mu_0} \left(\sum_{i,j}^{M,N} \rho_{i,j} \varphi_{i,j}^{int} \right. \\ & + \sum_i^N (\sigma_i^{bot} \varphi_i^{bot} + \sigma_i^{top} \varphi_i^{top}) \\ & \left. + \sum_j^M (\sigma_j^{left} \varphi_j^{left} + \sigma_j^{right} \varphi_j^{right}) \right) \end{aligned} \quad (14)$$

Με βάση τα παραπάνω, η ολική ενέργεια είναι:

$$E_{total} = \sum_{i,j}^{M,N} [K_1(1 - M^2 \cos^2 \varphi_{i,j})] + \quad (15)$$

$$J_s \sum_{i,j}^{M,N} M_{max} \cdot H \cos(\theta - \varphi_{i,j}) +$$

$$\frac{J_s^2}{4\pi\mu_0} \left(\sum_{i,j}^{M,N} \rho_{i,j} \varphi_{i,j}^{int} \right.$$

$$+ \sum_i^N (\sigma_i^{bot} \varphi_i^{bot} + \sigma_i^{top} \varphi_i^{top})$$

$$\left. + \sum_j^N (\sigma_j^{left} \varphi_j^{left} + \sigma_j^{right} \varphi_j^{right}) \right)$$

3. Συνοριακές συνθήκες

Είναι απαραίτητο να χρησιμοποιηθούν συνοριακές συνθήκες που θα καθορίζουν την μαγνήτιση του υλικού στα όρια της επιφάνειας. Η πιο απλή συνοριακή συνθήκη που διασφαλίζει ελεύθερη επιφάνεια στα όρια της μικροδομής και είναι κατάλληλη για το μέγεθος της προτεινόμενης διάταξης είναι η εξής:

$$\frac{\partial m}{\partial n} = 0 \quad (16)$$

4. Περιγραφή υπολογιστικού κώδικα

Έχουμε αναπτύξει έναν υπολογιστικό κώδικα, με τη βοήθεια του προγράμματος Matlab, που προβλέπει τη μαγνητική κατανομή του συστήματος, δεδομένων μερικών ιδιοτήτων του υλικού, όπως η σταθερά ανισοτροπίας, η μαγνήτιση κόρου κ.ά., βασιζόμενοι στη θεωρία του μικρομαγνητισμού. Ο κώδικας είναι εφαρμόσιμος σε συστήματα δύο διαστάσεων, αλλά είναι εύκολα επεκτάσιμος σε τρισδιάστατα συστήματα.

Σε κάθε υπολογισμό που πραγματοποιήθηκε μέσω του κώδικα αυτού, εισάγαμε τα εξής δεδομένα:

- Πλήθος κελιών κατά τον άξονα x [M]
- Πλήθος κελιών κατά τον άξονα y [N]
- Μέτρο του διανύσματος μαγνήτισης σε μορφή πίνακα [M_Matrix]
- Μαγνήτιση κόρου [J_s]
- Σταθερά ανισοτροπίας [K₁]
- Εφαρμοζόμενο εξωτερικό πεδίο [H]
- Γωνία που σχηματίζει το εφαρμοζόμενο πεδίο με τον εύκολο άξονα μαγνήτισης του υλικού [theta]

Ο υπολογισμός της ολικής μαγνήτισης του υλικού γίνεται μέσω της ελαχιστοποίησης της ολικής ενέργειας. Αρχικά, θεωρούμε ότι εφαρμόζουμε ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο μέγιστης τιμής και διεύθυνσης ίδια με τον εύκολο άξονα μαγνήτισης του υλικού, με σκοπό να αποκτήσει το υλικό ομοιόμορφη και δεδομένη μαγνήτιση σε όλη την επιφάνεια του.

Στη συνέχεια απαιτείται ελαχιστοποίηση της ενέργειας, θέτοντας την παράγωγο της ως προς τη μαγνήτιση του υλικού ίση με μηδέν.

$$\frac{\partial E_{total}}{\partial m} = 0 \quad (17)$$

Η λύση αυτής της εξίσωσης δίνει τις τιμές της γωνίας φ για τις οποίες η ενέργεια ελαχιστοποιείται. Επιπλέον, γίνεται υπολογισμός της τιμής της ελάχιστης αυτής ενέργειας, για κάθε λύση φ , κάνοντας δεκτή κάθε φορά την ελάχιστη τιμή.

Τέλος, χρησιμοποιείται ένας υπολογιστικός αυτόματος παραλληλισμός επαναληπτικών διαδικασιών (loop) με σκοπό να επαναλαμβάνεται η παραπάνω διαδικασία έως ότου παρουσιαστούν λύσεις, οι οποίες θα παρουσιάζουν απόκλιση από την προηγούμενη λύση της τάξης του 1%, δηλαδή έως ότου να συγκλίνουν οι τιμές της ελάχιστης ενέργειας και της αντίστοιχης γωνίας.

Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται για διάφορες τιμές του εξωτερικού πεδίου \vec{H} . Τα αποτελέσματα των μετρήσεων παριστάνονται γραφικά.

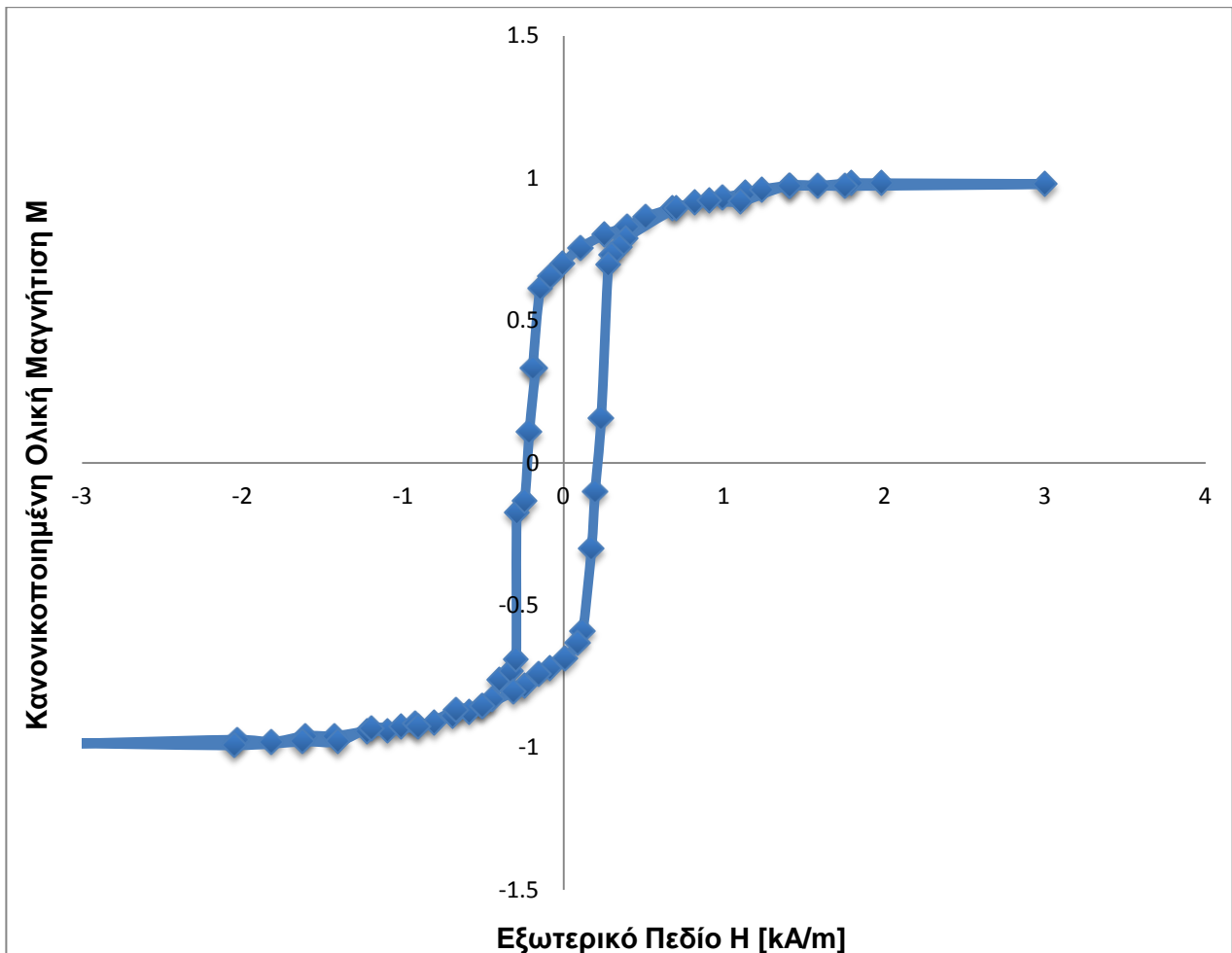
Αποτελέσματα και Συζήτηση

Χρησιμοποιώντας τον υπολογιστικό κώδικα που περιγράφηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, έγιναν υπολογισμοί της ολικής μαγνήτισης του υλικού σε σχέση με το εξωτερικό εφαρμοζόμενο πεδίο, H . Η γραφική αναπαράσταση των αποτελεσμάτων που προκύπτει, είναι οι χαρακτηριστικοί βρόχοι υστέρησης του υλικού (Σχ. 1-6).

Οι υπολογισμοί έγιναν σε διάταξη μεγέθους 10×10 κελιών, με σκοπό την μείωση της απαιτούμενης υπολογιστικής ισχύος. Αποδείχθηκε πειραματικά πως αντίστοιχα αποτελέσματα προέκυπταν και για μεγαλύτερο αριθμό κελιών, αυξάνοντας όμως δραματικά τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

Σε όλες τις μετρήσεις εφαρμόστηκε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο το οποίο κυμαινόταν μεταξύ 3 και -3 kA/m. Με υψηλές τιμές του εξωτερικού πεδίου εξασφαλιζόταν, αρχικά, μια ομοιόμορφη μαγνήτιση κορεσμού σε όλο το υλικό. Η μαγνήτιση κόρου έχει τιμή $J_s = 2.2$ Tesla.

Αρχικά, έγινε υπολογισμός της ολικής μαγνήτισης του υλικού με σταθερά ανισοτροπίας $K_1 = 10 \text{ kJ/m}^3$.

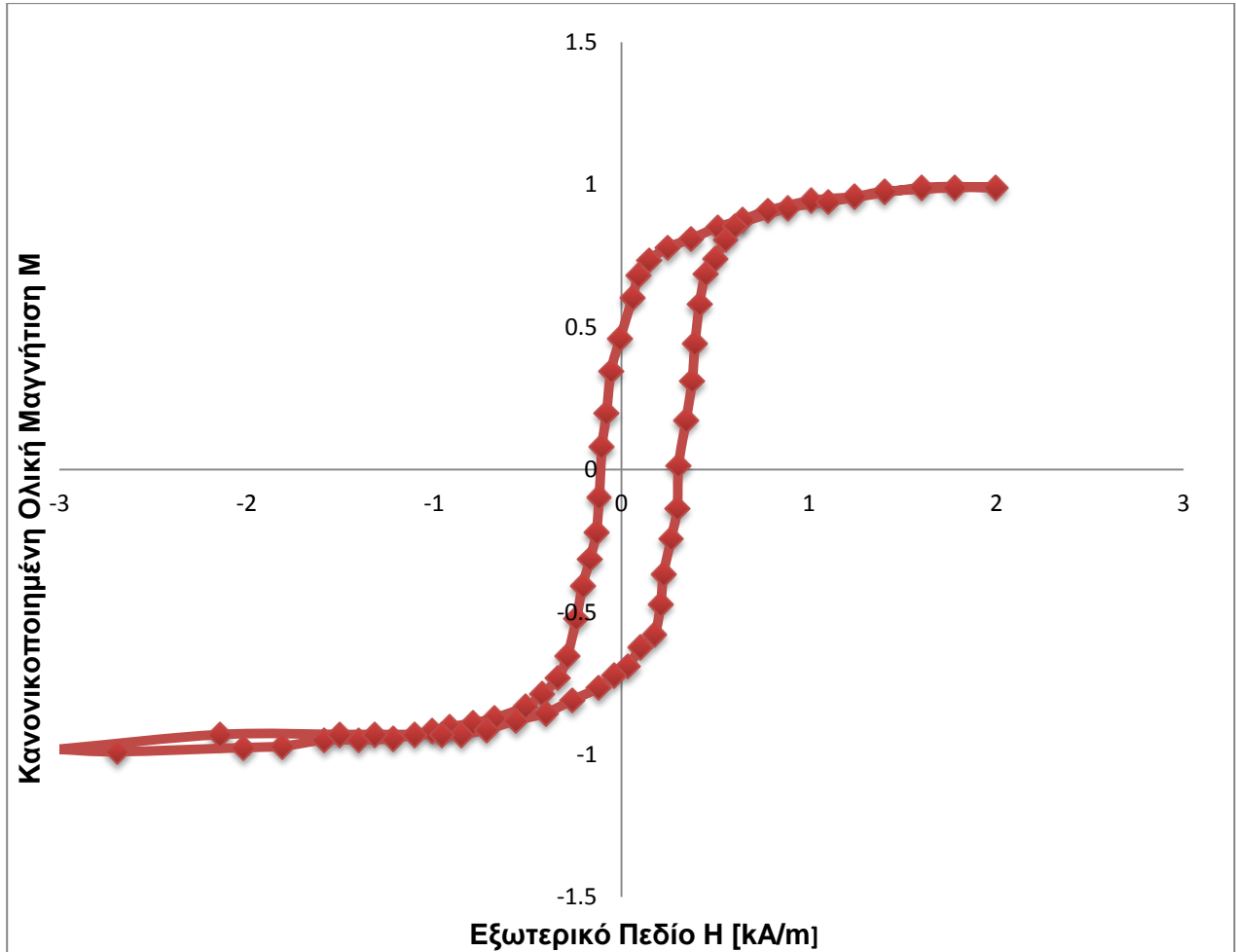


Σχήμα 1. Βρόχος υστέρησης υλικού με σταθερά ανισοτροπίας $K_1=10 \text{ kJ/m}^3$

Όπως φαίνεται και στο παραπάνω σχήμα, από το βρόχο υστέρησης που προκύπτει είναι φανερό ότι η μαγνήτιση κορεσμού συναντάται για τιμή του εξωτερικού πεδίου $\vec{H} \approx 1.2 \text{ kA/m}$. Η παραμένουσα μαγνήτιση του υλικού παρατηρείται για τιμή $M = 0.7$. Τέλος, το συνεκτικό πεδίο του υλικού είναι $H_c = 0.2 \text{ kA/m}$.

Ο κύριος βρόχος υστέρησης που εμφανίζεται παραπάνω, θα μπορούσε να χαρακτηρίζεται έναν προσανατολισμένο χάλυβα (oriented steel), δηλαδή ένα ισοτροπικό υλικό.

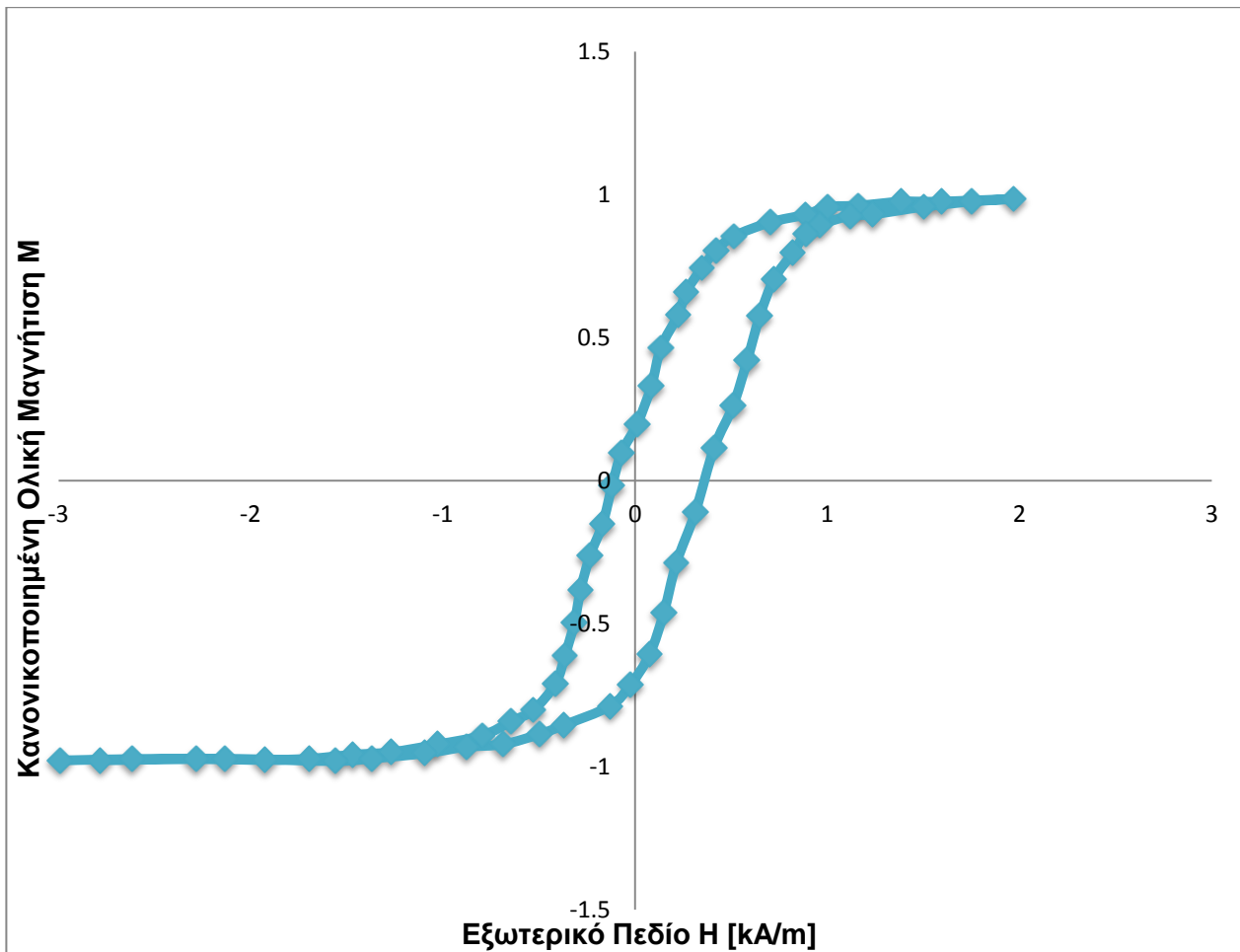
Στη συνέχεια, επαναλαμβάνεται η διαδικασία υπολογισμού της ολικής μαγνήτισης του υλικού, για διαφορετικές τιμές της σταθεράς ανισοτροπίας. Σκοπός είναι να παρατηρηθούν διαφορές στους βρόχους υστέρησης που προκύπτουν κατά τη διαδικασία της μαγνήτισης σε δύο περιπτώσεις. Είτε σε βρόχους που προκύπτουν από υλικά με διαφορετικές σταθερές ανισοτροπίας, είτε να παρατηρηθεί πώς μπορεί να μεταβληθεί ο βρόχος υστέρησης του ίδιου υλικού, όταν μεταβάλλεται η σταθερά ανισοτροπίας του υλικού. Από τους υπολογισμούς που έγιναν για 5 διαφορετικές τιμές της σταθεράς ανισοτροπίας, προέκυψαν οι ακόλουθοι βρόχοι υστέρησης.



Σχήμα 2. Βρόχος υστέρησης υλικού με σταθερά ανισοτροπίας $K_1 = 35 \text{ kJ/m}^3$

Ο βρόχος υστέρησης του Σχ. 2, αφορά υλικό με σταθερά ανισοτροπίας $K_1 = 35 \text{ kJ/m}^3$. Η μαγνήτιση κορεσμού παρατηρείται για τιμή εξωτερικού πεδίου $H = 1 \text{ kA/m}$ ενώ το συνεκτικό πεδίο του υλικού είναι $H_c = 0.2 \text{ kA/m}$. Η παραμένουσα μαγνήτιση είναι $M = 0.73$.

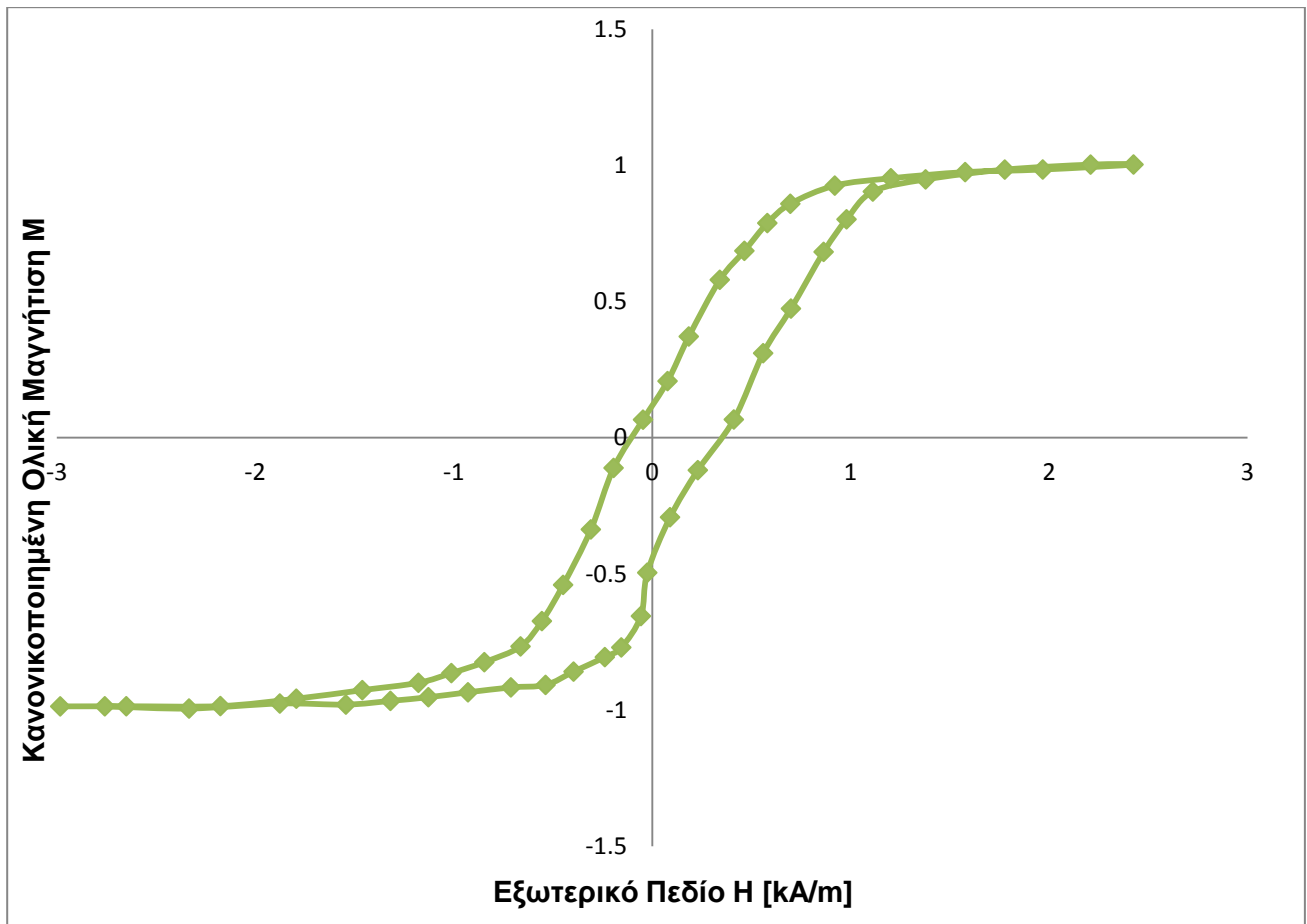
Τύποι χάλυβα που εμφανίζουν σταθερά ανισοτροπίας $K_1 \approx 35 \text{ kJ/m}^3$ είναι ηλεκτρικοί χάλυβες με περιεκτικότητα 4.59 wt % Si [43]. Αλλιώς, ο παραπάνω βρόχος θα μπορούσε να χαρακτηρίζει έναν μη προσανατολισμένο χάλυβα τύπου AISI 10XX.



Σχήμα 3. Βρόχος υστέρησης υλικού με σταθερά ανισοτροπίας $K_1 = 40 \text{ kJ/m}^3$

Στο παραπάνω σχήμα, παρατηρείται βρόχος υστέρησης που παρουσιάζει μεγαλύτερη κλίση σε σχέση με τους προηγούμενους. Ο βρόχος αυτός αναφέρεται σε σταθερά ανισοτροπίας $K_1 = 40 \text{ kJ/m}^3$. Η τιμή του συνεκτικού πεδίου που εμφανίζεται είναι $H_c = 0.25 \text{ kA/m}$, ελάχιστα μεγαλύτερη συγκριτικά με τους προηγούμενους βρόχους. Η παραμένουσα μαγνήτιση είναι $M = 0.85$, ενώ η μαγνήτιση κορεσμού συναντάται για τιμή εξωτερικού πεδίου $H = 1.3 \text{ kA/m}$.

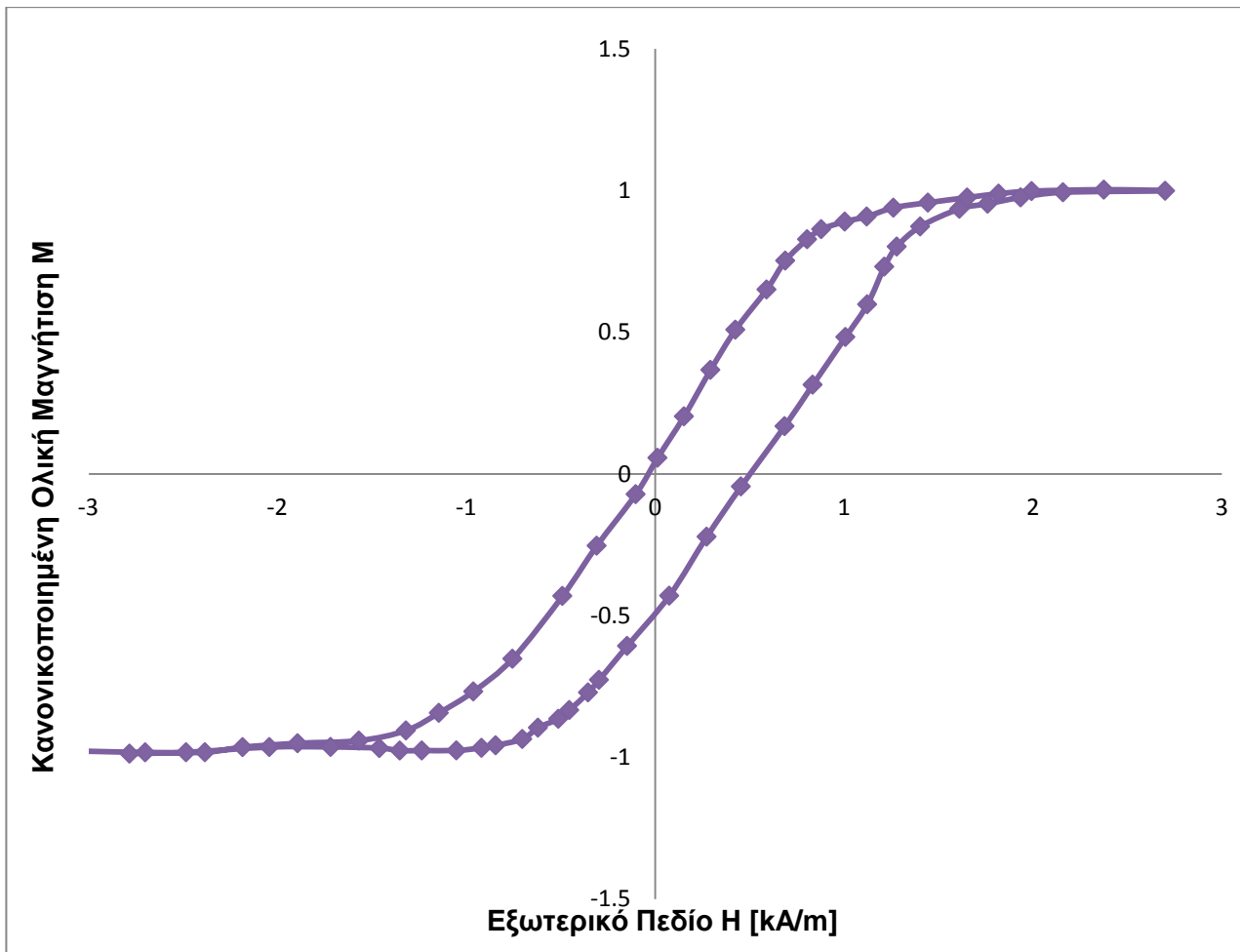
Χάλυβες με περιεκτικότητα 3.55 wt % Si [43] έχουν τιμές σταθεράς ανισοτροπίας που κυμαίνονται στα 40 kJ/m^3 . Επιπλέον, χάλυβες χαμηλής περιεκτικότητας σε άνθρακα παρουσιάζουν όμοιο βρόχο υστέρησης.



Σχήμα 4. Βρόχος υστέρησης υλικού με σταθερά ανισοτροπίας $K_1 = 45 \text{ kJ/m}^3$

Ο βρόχος υστέρησης που παρουσιάζεται στο Σχ. 4 προκύπτει από τους υπολογισμούς που πραγματοποιήθηκαν για τιμή της σταθεράς ανισοτροπίας $K_1 = 45 \text{ kJ/m}^3$. Παρατηρούμε πως το συνεκτικό πεδίο έχει τιμή $H_c = 0.25 \text{ kA/m}$ παρά το γεγονός ότι ο βρόχος αποκλίνει συμμετρικά από τον κατακόρυφο άξονα. Η παραμένουσα μαγνήτιση είναι ίση με $M = 0.68$, και η μαγνήτιση κορεσμού εμφανίζεται για τιμή εξωτερικού πεδίου ίση με $H = 1.38 \text{ kA/m}$.

Ο παραπάνω βρόχος υστέρησης θα μπορούσε να προκύψει από χάλυβα με περιεκτικότητα 2.45 wt % Si [43] ή σε χάλυβα υψηλής σκληρότητας, τύπου AISI 41XX.



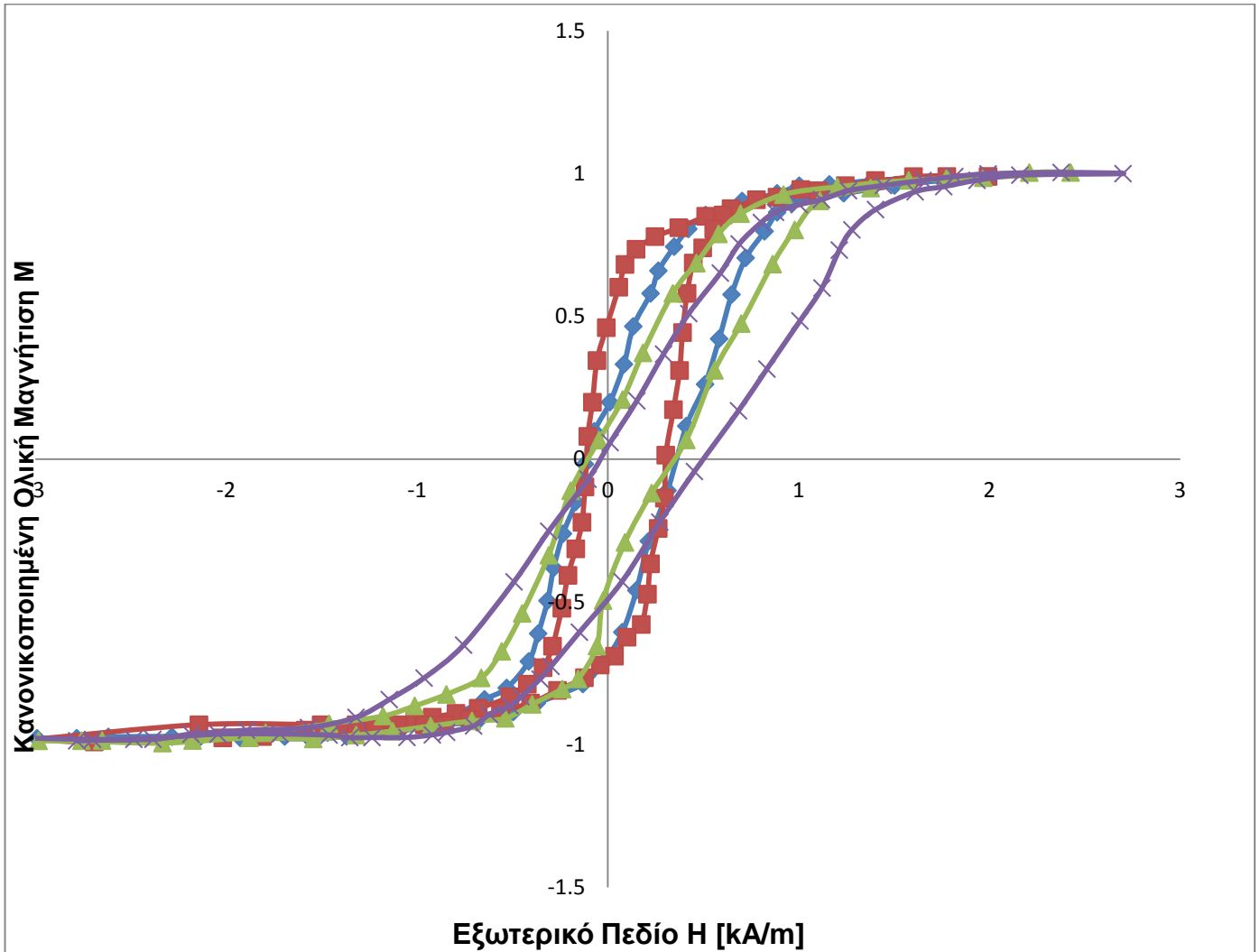
Σχήμα 5. Βρόχος υστέρησης υλικού με σταθερά ανισοτροπίας $K_1 = 50 \text{ kJ/m}^3$

Ο τελευταίος βρόχος προέκυψε από υπολογισμό για σταθερά ανισοτροπίας $K_1 = 50 \text{ kJ/m}^3$. Πρόκειται για βρόχο υστέρησης ο οποίος θα χαρακτήριζε χάλυβα με σκληρές μαγνητικές φάσεις μόνο, ή χάλυβα χαμηλότερης περιεκτικότητας σε πυρίτιο, της τάξης του 1.75 wt % Si [43].

Από το παραπάνω σχήμα, παρατηρείται ότι ο βρόχος συγκλίνει, δηλαδή εμφανίζεται μαγνήτιση κορεσμού, για τιμές εξωτερικού πεδίου $H = 1.65 \text{ kA/m}$. Η παραμένουσα μαγνήτιση είναι $M = 0.8$ και το συνεκτικό πεδίο εμφανίζεται πάλι στην τιμή $H_c = 0.25 \text{ kA/m}$.

Στον παραπάνω βρόχο παρατηρούμε ότι κατά τη μαγνήτιση του υλικού με τιμές του εξωτερικού πεδίου $0.12 \text{ kA/m} < H < 1.60 \text{ kA/m}$, παρατηρείται μια καμπύλωση του βρόχου. Όταν εμφανίζεται μια τέτοια καμπύλωση, κατά τη διάρκεια μαγνήτισης ενός υλικού, είναι αποτέλεσμα της κίνησης των τοιχωμάτων. Τα χαμηλά εφαρμοζόμενα πεδία ευνοούν την κίνηση των τοιχωμάτων, με σκοπό την ευθυγράμμιση της μαγνήτισης με το εξωτερικό πεδίο. Σε υψηλότερα πεδία, τα τοιχώματα περιστρέφονται απότομα, με σκοπό

την πλήρη ευθυγράμμιση των μαγνητικών διπόλων. Η περιστροφή των τοιχωμάτων εμφανίζεται ως καμπύλωση στο βρόχο υστέρησης.



Σχήμα 6. Σύγκριση βρόχων υστέρησης με διαφορετικές σταθερές ανισοτροπίας

Το Σχ. 6 απεικονίζει όλους τους βρόχους υστέρησης που προέκυψαν από τους υπολογισμούς του μοντέλου προσομοίωσης για διαφορετικές σταθερές ανισοτροπίας.

Η παραμένουσα μαγνήτιση παρουσιάζει ελάχιστη απόκλιση μεταξύ των τιμών της. Το γεγονός αυτό είναι αναμενόμενο καθώς η παραμένουσα μαγνήτιση εξαρτάται από το υλικό και την κατεργασία την οποία έχει υποστεί. Η αναμενόμενη αλλαγή της παραμένουσας μαγνήτισης θα ήταν η μείωση της, καθώς αυξάνεται η ανισοτροπία του υλικού. Η αντίδραση αυτή όμως, δεν ήταν εύκολο να παρατηρηθεί λόγω υπολογιστικών σφαλμάτων. Από τη στιγμή που δεν έχει εισαχθεί ως δεδομένο στο υπολογιστικό

πρόγραμμα, κάποιος παράγοντας που να αφορά την κατεργασία του υλικού, είναι λογικό να μην εμφανίζονται έντονες διαφορές στις τιμές της παραμένουσας μαγνήτισης.

Αντίστοιχα, το συνεκτικό πεδίο των παραπάνω βρόχων είναι αμετάβλητο. Επίσης, το συνεκτικό πεδίο εξαρτάται από την κατάσταση του δείγματος. Παράγοντες οι οποίοι θα μπορούσαν να επηρεάσουν το συνεκτικό πεδίο, είναι εξωτερικοί παράγοντες, όπως θερμική διέγερση. Επιπλέον, θα μπορούσαν να εμφανιστούν διαφορετικές τιμές συνεκτικού πεδίου στην περίπτωση όπου μελετώνται συγκριτικά, «σκληρά» και «μαλακά» σιδηρομαγνητικά υλικά. Σε «σκληρά» σιδηρομαγνητικά υλικά, ο βρόχος υστέρησης είναι πιο ευρύς, δηλαδή παρουσιάζει μεγαλύτερο συνεκτικό πεδίο σε σχέση με τα «μαλακά» σιδηρομαγνητικά υλικά.

Τέλος, η μαγνήτιση κορεσμού, παρουσιάζει ελάχιστες διαφορές στις τιμές που εμφανίζει. Η τιμή της μαγνήτισης κορεσμού εξαρτάται από το είδος του υλικού. Οι βρόχοι υστέρησης του ίδιου υλικού έχουν ίδιες τιμές μαγνήτισης κορεσμού, ενώ, εξετάζοντας διαφορετικά υλικά, προκύπτουν διαφορετικές τιμές της.

Εξετάζοντας συγκριτικά τους βρόχους του Σχ. 6, αξίζει να σχολιαστεί, πώς αλλάζουν οι παραπάνω βρόχοι σε σχέση με τη σταθερά ανισοτροπίας. Παρατηρείται, ότι με αύξηση της τιμής της σταθεράς ανισοτροπίας K_1 , οι βρόχοι παρουσιάζουν όλο και αυξανόμενη κλίση ως προς τον κατακόρυφο άξονα. Δηλαδή, όσο λιγότερο ισοτροπικό είναι το υλικό, τόσο ισχυρότερο εξωτερικό πεδίο απαιτείται για να φτάσει στην κατάσταση μαγνήτισης.

Αναφέρθηκε προηγουμένως, ότι διαφορετικά υλικά, έχουν διαφορετικές τιμές της σταθεράς ανισοτροπίας. Να σημειωθεί ότι μια τυπική τιμή της σταθεράς αυτής, ενός μη προσανατολισμένου χάλυβα, είναι $K_1 = 48 \text{ kJ/m}^3$. Υπάρχει όμως δυνατότητα να αλλάξει η ανισοτροπία του ίδιου του υλικού, έπειτα από διεργασίες που έχει υποστεί. Μερικοί τρόποι με τους οποίους επιτυγχάνεται αυτό, είναι οι εξής:

- 1) Αλλαγή κραμάτωσης. Αυξάνοντας τα ποσοστά περιεκτικότητας του πυριτίου (Si) στο υλικό, μειώνεται η σταθερά ανισοτροπίας του υλικού. Το πυρίτιο έχει τη δυνατότητα να δομεί τους κόκκους του υλικού προς τη προτιμητέα διεύθυνση, ευνοώντας έτσι την ανάπτυξη εύκολων αξόνων μαγνήτισης του υλικού. Συνεπώς, το υλικό γίνεται περισσότερο ισοτροπικό.
- 2) Αύξηση των θλιπτικών τάσεων. Ο χάλυβας εμφανίζει θλιπτικές τάσεις. Με διεργασίες όπως ανόπτηση του υλικού, οι θλιπτικές αυτές τάσεις ενισχύονται, προκαλώντας αύξηση της ανισοτροπίας του υλικού.
- 3) Απότομη ψύξη του υλικού. Στα σιδηρομαγνητικά υλικά, ένας τρόπος επεξεργασίας τους είναι η θέρμανση. Αρχικά το υλικό θερμαίνεται, και στη συνέχεια περνάει το στάδιο της ανακρυστάλλωσης, με σκοπό οι κόκκοι να αποκτήσουν αρκετά μεγάλο μέγεθος ώστε να μην σπάσουν. Στην περίπτωση όπου μετά τη θέρμανση, το

υλικό υπόκειται σε απότομη ψύξη, τότε οι κόκκοι του υλικού είτε είναι αρκετά μικροί, είτε παρουσιάζουν γωνιώδη μορφολογία, γεγονός που αυξάνει την ανισοτροπία του υλικού.

Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία παρουσιάστηκε μία μέθοδος προσομοίωσης υπολογισμού της διαδικασίας μαγνήτισης σιδηρομαγνητικών υλικών, με βάση την ενεργειακή θεώρηση μέσω των εξισώσεων του μικρομαγνητισμού. Με βάση τους όρους της ενέργειας που χρησιμοποιήθηκαν και τη συνεισφορά του καθενός στην ολική ενέργεια, και αντίστοιχα στην ολική μαγνήτιση του υλικού, αξίζει να παρατηρηθούν τα εξής:

1. Οι τοπικοί όροι ενέργειας, όπως η ενέργεια ανισοτροπίας και η ενέργεια εξωτερικού πεδίου, είναι εύκολα υπολογίσιμοι μέσω ολοκλήρωσης των συγκεκριμένων όρων της ενέργειας στο χώρο, καθώς αφορούν μόνο την αλληλεπίδραση γειτονικών διπόλων. Συνεπώς, κατά τη διαδικασία υπολογισμού των ενεργειών αυτών, δεν κρίνεται αναγκαίο να εισαχθούν περαιτέρω συνθήκες για να διασφαλιστεί η σωστή συνεισφορά τους στην ολική ενέργεια του υλικού.
2. Η συνεισφορά των τοπικών όρων ενέργειας δεν είναι σταθερή για όλες τις τιμές του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου. Για το λόγο αυτό, είναι ενδιαφέρον να εξεταστεί πώς επηρεάζουν οι όροι αυτοί, την ολική μαγνήτιση του υλικού, για διάφορες τιμές του πεδίου. Συγκεκριμένα, ο όρος της ενέργειας ανισοτροπίας, μπορεί να προκαλέσει σημαντικές διαφορές στην χαρακτηριστική καμπύλη μαγνήτισης του υλικού, καθώς επηρεάζει την τιμή της ανισοτροπικής σταθεράς.
3. Η ενέργεια απομαγνήτισης του υλικού, ή αλλιώς, η ενέργεια μέσου πεδίου, αποτελεί έναν μη τοπικό όρο ενέργειας. Δηλαδή εξαρτάται από τη συμπεριφορά των διπόλων σε ολόκληρη την επιφάνεια και τον όγκο του υλικού. Για τον υπολογισμό αυτού του όρου ενέργειας, απαιτείται να εισαχθούν στον υπολογιστικό κώδικα στοιχεία που αφορούν τα επιφανειακά και χωρικά φορτία όλου του υλικού, καθώς επίσης και εξισώσεις που περιγράφουν τον τρόπο με τον οποίο η κατανομή φορτίων επηρεάζει τα γειτονικά και τα απομακρυσμένα δίπολα.
4. Τέλος, αποδείχτηκε ότι είναι αναγκαίο να εισαχθούν στον υπολογιστικό κώδικα συνοριακές συνθήκες οι οποίες θα διασφαλίζουν τη σωστή μορφή των όρων ενέργειας στα όρια του προσομοιωμένου υλικού με το εξωτερικό περιβάλλον αυτού.

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τους υπολογισμούς της ολικής μαγνήτισης είναι οι βρόχοι υστέρησης υλικών με διαφορετικές σταθερές ανισοτροπίας. Μελετώντας τις βασικές διαφορές στους χαρακτηριστικούς αυτούς βρόχους υστέρησης, προέκυψαν τα ακόλουθα συμπεράσματα:

1. Αυξάνοντας την ανισοτροπία του υλικού, ο βρόχος υστέρησης που χαρακτηρίζει το υλικό αποκτά μεγαλύτερη κλίση ως προς τον οριζόντιο άξονα της μαγνήτισης. Συνεπώς, όσο αυξάνεται η ανισοτροπία του υλικού, τόσο ισχυρότερο εξωτερικό πεδίο απαιτείται για να προσανατολίσει πλήρως τις μαγνητικές περιοχές του υλικού.
2. Μόνο ένα υλικό, όπως ένας προσανατολισμένος χάλυβας, παρουσιάζει καμπύλη μαγνήτισης η οποία είναι συμμετρική ως προς τον αντίστοιχο άξονα. Αλλιώς, μόνο για τιμές της σταθεράς ανισοτροπίας μικρότερες του $K_1 = 10 \text{ kJ/m}^3$, θα μπορούσε ένα υλικό να χαρακτηριστεί ως ιστροπικό.
3. Η αλλαγή της ανισοτροπίας δεν επηρεάζει το πάχος της καμπύλης μαγνήτισης, δηλαδή δεν επηρεάζει το συνεκτικό πεδίο που εμφανίζεται. Το συνεκτικό πεδίο θα μπορούσε να επηρεαστεί μόνο από εξωτερικούς παράγοντες που επηρεάζουν την κατάσταση του υλικού ή από κάποια επεξεργασία του υλικού.
4. Τέλος, η παραμένουσα μαγνήτιση παρουσιάζει μικρή μείωση, κατά την αύξηση της ανισοτροπίας του υλικού. Η μείωση αυτή είναι δύσκολο να παρατηρηθεί, κατά τη διαδικασία της προσομοίωσης, λόγω υπολογιστικών σφαλμάτων.

Βιβλιογραφία

1. Jiles, D.C., *Introduction to Magnetism and Magnetic Materials, Second Edition* 1998: Taylor & Francis.
2. Reed, M.L., et al., *Room temperature ferromagnetic properties of (Ga, Mn)N*. Applied Physics Letters, 2001. **79**(21): p. 3473-3475.
3. Williams, L.P., *Ampère's electrodynamic molecular model*. Contemporary Physics, 1962. **4**(2): p. 113-123.
4. Langevin, P., *Magnetism and the Theory of electrons*. Ann. Chim. Phys., 1905. **8**(5): p. 70-127.
5. Weiss, P., Comptes Rendus Chimie, 1906. **143**: p. 1136.
6. Weiss, P., J. Physics, 1907. **6**: p. 661.
7. Arrott, A., *Criterion for Ferromagnetism from Observations of Magnetic Isotherms*. Physical Review, 1957. **108**(6): p. 1394-1396.
8. von Helmlolt, R., et al., *Giant negative magnetoresistance in perovskitelike $\text{La}_{2/3}\text{Ba}_{1/3}\text{MnO}_x$ ferromagnetic films*. Physical Review Letters, 1993. **71**(14): p. 2331-2333.
9. Guo, Z.B., et al., *Large Magnetic Entropy Change in Perovskite-Type Manganese Oxides*. Physical Review Letters, 1997. **78**(6): p. 1142-1145.
10. Weiss, P., *The hypothesis of the molecular field and the property of ferromagnetism*. J. de Phys. Rad. , 1907. **6**: p. 661-690.
11. Anderson, P.W., *Generalizations of the Weiss Molecular Field Theory of Antiferromagnetism*. Physical Review, 1950. **79**(4): p. 705-710.
12. Ising, E., *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik, 1925. **31**(1): p. 253-258.
13. Pauling, L., *The Nature of the Interatomic Forces in Metals*. Physical Review, 1938. **54**(11): p. 899-904.
14. Falk, U., et al., *Exchange mechanisms in $\text{CsMn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Br}_3$* . Journal of Applied Physics, 1985. **57**(8): p. 3332-3334.

15. Getzla, M., *Fundamentals of magnetism* 2008, New York: Springer Berlin Heidelberg.
16. Ibach, H., *Festkörperphysik* 1985: Springer Berlin Heidelberg
17. Moriya, T., *Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism*. Physical Review, 1960. **120**(1): p. 91-98.
18. Barkhausen, H., *Two phenomena discovered with the help of the new amplifiers*. Phys. Z., 1919. **20**: p. 401-403.
19. Bertotti, G. and I.D. Mayergoyz, *The Science of Hysteresis: Physical modeling, micromagnetics, and magnetization dynamics* 2006: Academic.
20. Preisach, F., *Investigations on the Barkhausen effect*. Ann. Physik 1929. **3**: p. 737-799.
21. Sixtus, K.J. and L. Tonks, *Propagation of Large Barkhausen Discontinuities*. Physical Review, 1931. **37**(8): p. 930-958.
22. Bloch, F., *On the theory of the exchange problem and the remanence phenomenon of ferromagnets*. Phys. Z., 1932. **74**: p. 295-335.
23. Heisenberg, W., *On the theory of ferromagnetism*. Phys. Z., 1928. **49**: p. 619-636.
24. Kronmüller, H. and M. Fritzsche, *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids* 2003: Cambridge University Press.
25. Schryer, N.L. and L.R. Walker, *The motion of 180° domain walls in uniform dc magnetic fields*. Journal of Applied Physics, 1974. **45**(12): p. 5406-5421.
26. LaBonte, A.E., *Two-Dimensional Bloch-Type Domain Walls in Ferromagnetic Films*. Journal of Applied Physics, 1969. **40**(6): p. 2450-2458.
27. Thiele, A.A., *Steady-State Motion of Magnetic Domains*. Physical Review Letters, 1973. **30**(6): p. 230-233.
28. Hubert, A. and R. Schäfer, *Magnetic Domains: The Analysis of Magnetic Microstructures* 1998: Springer.
29. Nakamura, K., et al., *First-principles calculation of the exchange interaction and the exchange force between magnetic Fe films*. Physical Review B, 1997. **56**(6): p. 3218-3221.
30. Daalderop, G.H.O., P.J. Kelly, and M.F.H. Schuurmans, *First-principles calculation of the magnetocrystalline anisotropy energy of iron, cobalt, and nickel*. Physical Review B, 1990. **41**(17): p. 11919-11937.

31. Zener, C., *Classical Theory of the Temperature Dependence of Magnetic Anisotropy Energy*. Physical Review, 1954. **96**(5): p. 1335-1337.
32. Soohoo, R.F., *General Exchange Boundary Condition and Surface Anisotropy Energy of a Ferromagnet*. Physical Review, 1963. **131**(2): p. 594-601.
33. Bruno, P., *Magnetic surface anisotropy of cobalt and surface roughness effects within Neel's model*. Journal of Physics F: Metal Physics, 1988. **18**(6): p. 1291.
34. Malozemoff, A.P., *Random-field model of exchange anisotropy at rough ferromagnetic-antiferromagnetic interfaces*. Physical Review B, 1987. **35**(7): p. 3679-3682.
35. Hubert, A., *Stray-Field-Free Magnetization Configurations*. physica status solidi (b), 1969. **32**(2): p. 519-534.
36. Callen, E. and H.B. Callen, *Magnetostriction, Forced Magnetostriction, and Anomalous Thermal Expansion in Ferromagnets*. Physical Review, 1965. **139**(2A): p. A455-A471.
37. Kwon, Y.W. and H. Bang, *The Finite Element Method Using MATLAB, Second Edition* 2000: CRC Press.
38. Zimmerman, W.B.J., *Multiphysics Modelling with Finite Element Methods*. Series on stability 2006: World Scientific.
39. Koehler, T.R. and D.R. Fredkin, *Finite element methods for micromagnetics*. Magnetics, IEEE Transactions on, 1992. **28**(2): p. 1239-1244.
40. Fredkin, D.R. and T.R. Koehler, *Hybrid method for computing demagnetizing fields*. Magnetics, IEEE Transactions on, 1990. **26**(2): p. 415-417.
41. Fredkin, D.R. and T.R. Koehler, *Numerical micromagnetics: prolate spheroids*. Magnetics, IEEE Transactions on, 1989. **25**(5): p. 3473-3475.
42. Bagnères-Viallix, A., P. Baras, and J.B. Albertini, *2D and 3D calculations of micromagnetic wall structures using finite elements*. Magnetics, IEEE Transactions on, 1991. **27**(5): p. 3819-3822.
43. Björn, W., N. Per, and N. Lars, *The Magnetocrystalline Anisotropy Constants of Iron and Iron-silicon Alloys*. Physica Scripta, 1975. **11**(6): p. 383.