

Αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής και αλληλεπιδράσεις Dzyaloshinskii-Moriya (DMI)

Στο παρόν κεφάλαιο θα εξηγήσουμε την κβαντομηχανική προέλευση των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής που είναι υπεύθυνες για την ύπαρξη μαγνητικής τάξης και αυθόρμητης μαγνήτισης. Τονίζουμε ότι παρότι οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής είναι μικρής εμβέλειας (υφίστανται μεταξύ γειτονικών ατόμων) έχουν σαν αποτέλεσμα την εμφάνιση μαγνητικής τάξης μικρής εμβέλειας. Χωρίς αυτή όλα τα μαγνητικά υλικά θα ήταν παραμαγνητικά και δεν θα είχαν καμία εφαρμογή. Ακόμα θα δούμε συνοπτικά ποια είναι τα βασικά είδη μαγνητικής τάξης που προκύπτουν ανάλογα με το είδος των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής, πως οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής ευθύνονται για την εμφάνιση μαγνητικών περιοχών και τέλος θα περιγράψουμε την προέλευση των αλληλεπιδράσεων Dzyaloshinskii-Moriya.

1.1 Η Χαμιλτονιανή του Heisenberg

Πρώτος ο Weiss το 1907 προσπάθησε να εξηγήσει την αυθόρμητη μαγνήτιση των υλικών σαν αποτέλεσμα αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μαγνητικών ροπών, αλλά οι μαγνητοστατικές αλληλεπιδράσεις που θεώρησε δεν ήταν αρκετά ισχυρές να εξηγήσουν την διατήρηση της μαγνητικής τάξης σε τόσο υψηλές θερμοκρασίες (π.χ. 360K για το Νικέλιο). Με την ανάπτυξη της κβαντικής θεωρίας οι Heisenberg και Dirac¹ μπόρεσαν να κατανοήσουν την προέλευση αυτών των αλληλεπιδράσεων.

Οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής περιγράφονται από την Χαμιλτονιανή του Heisenberg που μας δίνει την ενέργεια ανταλλαγής μεταξύ δύο γειτονικών σπιν $\vec{S}_i, \vec{S}_j$. Η αλληλεπίδραση ανταλλαγής δίνεται από τη σχέση²:

$$\mathcal{H} = -2J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.1)$$

Η σταθερά J_{ij} ονομάζεται ολοκλήρωμα ανταλλαγής. Είναι φανερό ότι για να ελαχιστοποιείται αλγεβρικά ο όρος $-2J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ όταν $J_{ij} > 0$ ευνοείται ο παράλληλος σιδηρομαγνητικός προσανατολισμός ($\uparrow\uparrow$), ενώ για $J_{ij} < 0$ ευνοείται ο αντιπαράλληλος αντισιδηρομαγνητικός προσανατολισμός ($\uparrow\downarrow$) δύο γειτονικών σπιν $\vec{S}_i, \vec{S}_j$.

1.2 Αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής και η προέλευσή τους

Όταν δυο γειτονικά άτομα έχουν ασύζευκτα ηλεκτρόνια, αν τα σπιν των ηλεκτρονίων είναι παράλληλα ή αντιπαράλληλα επηρεάζει το αν τα ηλεκτρόνια μπορούν να μοιραστούν την ίδια στοιβάδα ως αποτέλεσμα της κβαντικής μηχανικής που λέγεται αλληλεπίδραση ανταλλαγής (exchange interaction). Αυτό με τη σειρά του επηρεάζει την θέση των ηλεκτρονίων και την (ηλεκτροστατική) αλληλεπίδραση Coulomb και συνεπώς τη διαφορά ενέργειας μεταξύ αυτών των καταστάσεων. Αυτή η διαφορά ενέργειας μπορεί να είναι τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη από τις διαφορές ενέργειας που σχετίζονται με την μαγνητική

αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου (magnetic dipole-dipole interaction) λόγω του προσανατολισμού του διπόλου³. Ως αποτέλεσμα, σε σιδηρομαγνητικά υλικά, γειτονικά σπιν τείνουν να ευθυγραμμιστούν στην ίδια κατεύθυνση.

Οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής θα μπορούσαν να εξηγηθούν σαν αποτέλεσμα της ηλεκτροστατικής άπωσης Coulomb (e^2/r) μεταξύ των ηλεκτρονίων και της απαγορευτικής αρχής του Pauli^{4,5}, η οποία απαιτεί από την κυματοσυνάρτηση που περιγράφει έναν αριθμό φερμιονίων (όπως τα ηλεκτρόνια), να είναι αντισυμμετρική στην εναλλαγή των συντεταγμένων (χωρικών και σπιν) ενός οποιουδήποτε ζεύγους $\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$ (ή αλλιώς απαίτηση αντισυμμετρικότητας Ψ).

$$\left(\begin{matrix} \text{Αλληλεπίδραση} \\ \text{Ανταλλαγής} \end{matrix} \right) = \left(\begin{matrix} \text{Αλληλεπίδραση} \\ \text{Coulomb} \end{matrix} \right) + \left(\begin{matrix} \text{Αντισυμμετρικότητα} \\ \Psi \end{matrix} \right)$$

Για να είναι η ολική συνάρτηση αντισυμμετρική, αν το χωρικό μέρος είναι συμμετρικό, τότε το μέρος που έχει σχέση με το σπιν πρέπει να είναι αντισυμμετρικό και αντίστροφα κατά το σχήμα:

$$\Psi(\text{Αντισυμμετρικό}) = \begin{cases} \overbrace{(\text{Αντισυμμετρικό})}^{\text{χωρικό}} \times \overbrace{(\text{Συμμετρικό})}^{\text{σπιν}} \\ \text{ή} \\ (\text{Συμμετρικό}) \times (\text{Αντισυμμετρικό}) \end{cases}$$

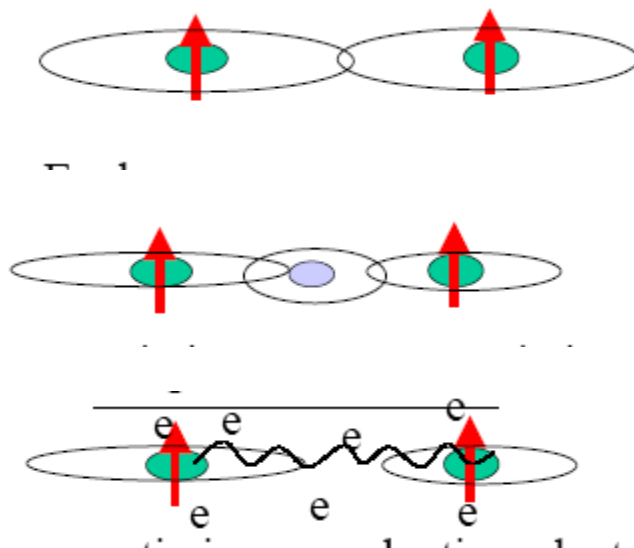
Έτσι μια καθαρά ηλεκτρικής φύσης αλληλεπίδραση όπως η Coulomb που σχετίζεται μόνο με το χωρικό μέρος, μπορεί να επηρεάζει την διάταξη των σπιν.

Ποιοτικά θα μπορούσε κανείς να πει ότι, όταν δυο ηλεκτρόνια είναι χωρικά πολύ κοντά, πρέπει σύμφωνα με την αρχή του Pauli να έχουν διαφορετικά σπιν. Αντίθετα όταν έχουν ίδια σπιν πρέπει να αποφεύγουν το ένα το άλλο. Σε μεγάλες αποστάσεις, η αλληλεπικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων των ηλεκτρονίων μηδενίζεται και συνεπώς και η αλληλεπίδραση ανταλλαγής είναι μηδέν.

1.3 Είδη έμμεσης ανταλλαγής

Εκτός από την αλληλεπίδραση ανταλλαγής στην οποία αναφερθήκαμε και στην οποία έχουμε άμεση επικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων των γειτονικών ατόμων, υπάρχουν περιπτώσεις όπου η αλληλεπίδραση ανταλλαγής μεταξύ των μαγνητικών ατόμων γίνεται έμμεσα μέσω των μαγνητικών ατόμων. Δύο πολύ τυπικά παραδείγματα έμμεσης ανταλλαγής είναι:

- i) υπερανταλλαγή (superexchange) και η διπλή ανταλλαγή (double exchange) όπου οι αλληλεπιδράσεις μεταφέρονται μέσω των τροχιακών των μη μαγνητικών ατόμων. Αυτά τα είδη ανταλλαγής είναι πολύ συνηθισμένα στους φερρίτες και γενικά τα οξείδια των στοιχείων μετάπτωσης.
- ii) η ανταλλαγή Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY). Απαντάται σε μεταλλικά συστήματα των στοιχείων μετάπτωσης. Ο ενδιάμεσος είναι τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας.

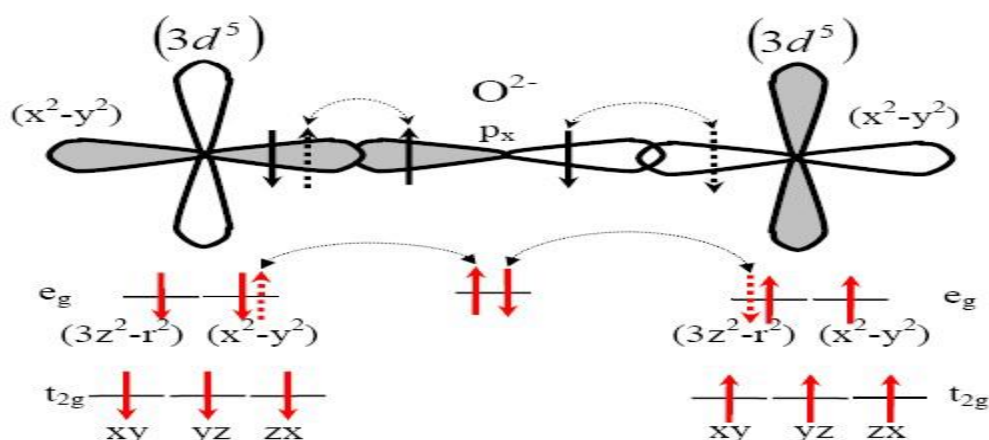


Σχήμα 1.1 Άμεση και έμμεση ανταλλαγή. Στο πάνω μέρος απεικονίζεται η άμεση ανταλλαγή, στο δεύτερο μέρος απεικονίζεται η υπερανταλλαγή (ο ενδιάμεσος είναι τροχιακό) και στο τρίτο μέρος απεικονίζεται η ανταλλαγή RKKY (ο ενδιάμεσος είναι τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας).

1.3.1 Υπερανταλλαγή

Η ιδέα της υπερανταλλαγής πρωτοχρησιμοποιήθηκε από τον Kramers το 1934, όταν παρατηρήθηκε ότι μπορεί να υπάρχει ασθενής μαγνητική σύζευξη μεταξύ ιόντων, ακόμα και όταν αυτά χωρίζονται από αρκετές διαμαγνητικές ομάδες. Είναι ο βασικός μηχανισμός ανταλλαγής σε οξείδια και μονωτές. Το είδος της ανταλλαγής μπορεί να ποικίλει ανάλογα με την γωνία του δεσμού και την ηλεκτρονική τους δομή. Οι διάφορες περιπτώσεις περιγράφονται από τους λεγόμενους κανόνες Goodenough-Kanamori-Anderson (GKA).

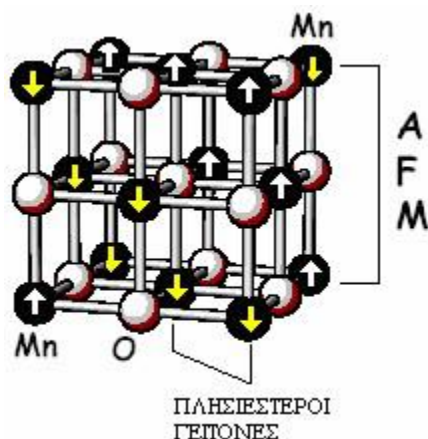
Σαν πρώτο παράδειγμα δίνουμε την αλληλεπίδραση δύο δισθενών ατόμων μαγγανίου μέσω των p_x τροχιακών του οξυγόνου. Ο δεσμός $\text{Mn}^{2+}(3d^5)\text{-O}^{2-}(2p^6)\text{-Mn}^{2+}(3d^5)$ είναι κατά βάση ιοντικός αλλά επιτρέπει κάποια ανταλλαγή ηλεκτρονίου. Θα δούμε ποιοτικά πως μέσω αυτής της ανταλλαγής ηλεκτρονίου αναπτύσσεται αντισυνισπρωμαγνητική σύζευξη μεταξύ τους. Ο μηχανισμός μπορεί να γίνει ποιοτικά κατανοητός στα εξής πλαίσια: το διπλά κατειλημμένο p_x τροχιακό του οξυγόνου έχει δύο ηλεκτρόνια αντίθετου σπιν.



Σχήμα 1.2 Ο μηχανισμός της υπερανταλλαγής (ο ενδιάμεσος είναι τροχιακό).

Αν ένα από τα p_x ηλεκτρόνια του οξυγόνου βρεθεί στο αντίστοιχο ιόν Mn, τότε ο δεσμός βρίσκεται στη διεγερμένη κατάσταση $Mn^+(3d^6)-O^-(2p^5)-Mn^{2+}(3d^5)$. Το ηλεκτρόνιο του οξυγόνου που τώρα βρίσκεται στο αριστερά ιόν Mn^+ (Σχήμα 1.2) θα πρέπει να έχει αναγκαστικά αντίθετο σπιν με το ηλεκτρόνιο του συγκεκριμένου τροχιακού του Mn και επομένως και με τα πέντε ηλεκτρόνια του Mn, σύμφωνα με τον κανόνα του Hund. Το ίδιο ισχύει και για το άλλο ηλεκτρόνιο p_x (αντίθετου όμως σπιν ως προς το προηγούμενο ηλεκτρόνιο p_x , δεξ σχήμα 1.1) όταν αυτό μεταφέρεται στο δεξιό ιόν Mn κατά το σχήμα $Mn^{2+}(3d^5)-O^-(2p^5)-Mn^+(3d^6)$. Συνεπώς ο απεντοπισμός των ηλεκτρονίων p_x ευνοείται όταν έχουμε αντισιδηρομαγνητική διάταξη των σπιν μεταξύ των δύο κατιόντων, ώστε να μπορεί το καθένα από αυτά (που έχουν αντίθετο σπιν) να βρεθεί στο αντίστοιχο ιόν Mn. Επειδή μέσω του απεντοπισμού έχουμε μείωση της ενέργειας, η αντισιδηρομαγνητική σύζευξη μεταξύ των δύο σπιν ευνοείται ενεργειακά. Ακριβώς όμοια θα μπορούσε να εξηγηθεί η αλληλεπίδραση δύο τρισθενών ατόμων σιδήρου μέσω του οξυγόνου. Αυτό αναφέρεται ως ο πρώτος κανόνας GKA: «Η ανταλλαγή σε γωνία 180° μεταξύ ημι-γεμάτων τροχιακών είναι αντισιδηρομαγνητική». Τί ίδιο συμβαίνει και για το ζεύγος κατιόντων Mn^{4+} (και Mn^{3+} σε μερικές περιπτώσεις) που συνδέονται μέσω οξυγόνου $Mn^{4+}(3d^3)-O^-(2p^6)-Mn^{4+}(3d^3)$. Η πιθανότητα κάποια από τα p_x τροχιακά του οξυγόνου να βρεθεί στο αντίστοιχο ιόν Mn αυξάνεται όταν έχει σπιν παράλληλο με αυτό των ιόντων. Πάλι όμως εφόσον τα δύο p_x ηλεκτρόνια έχουν αντίθετο σπιν ευνοείται αντισιδηρομαγνητική σύζευξη.

Συνέπεια του έμμεσου χαρακτήρα των αλληλεπιδράσεων υπερανταλλαγής, μέσω των τροχιακών του οξυγόνου των οποίων οι λοβοί σχηματίζουν γωνία 180° , είναι το γεγονός ότι αυτές ισχυροποιούνται κατά μήκος των τροχιακών. Για παράδειγμα (Σχήμα 1.3) στο MnO η αλληλεπίδραση μεταξύ πρώτων γειτόνων Mn δεν είναι τόσο ισχυρή όσο μεταξύ των δεύτερων γειτόνων.



Σχήμα 1.3 Κρυσταλλική και μαγνητική δομή του MnO. Αντισιδηρομαγνητικά διατεταγμένες δεν είναι οι μαγνητικές ροπές των πλησιέστερων ατόμων Mn αλλά αυτών που μεσολαβεί άτομο οξυγόνου μέσω των τροχιακών του οποίου μεταφέρονται οι αλληλεπιδράσεις.

Αυτό είναι σε συμφωνία με όσα εκτέθηκαν πιο πάνω μεταξύ των πρώτων γειτόνων Mn δεν μεσολαβούν άτομα οξυγόνου μέσω των τροχιακών των οποίων δρα ο μηχανισμός της υπερανταλλαγής.

Ας εξετάσουμε τώρα την περίπτωση υπερανταλλαγής σε γωνία 90° μεταξύ δύο μισογεμάτων τροχιακών d μέσω ενός ανιόντος οξυγόνου. Σε αναλογία με τα όσα αναφέρθηκαν στην περίπτωση της υπερανταλλαγής 180° , τα ηλεκτρόνια από τα p τροχιακά του οξυγόνου μπορούν να μεταπηδήσουν στα d τροχιακά του μαγνητικού ατόμου με τα οποία υπάρχει επικάλυψη. Και πάλι, ένα ηλεκτρόνιο του οξυγόνου όταν βρεθεί στο μαγνητικό ιόν θα πρέπει να έχει αναγκαστικά αντίθετο σπιν με το ηλεκτρόνιο του συγκεκριμένου ατόμου, σύμφωνα με τους κανόνες του Hund. Όμως αυτή την φορά τα ηλεκτρόνια του οξυγόνου που

μεταπηδούν στα δύο διαφορετικά μαγνητικά ιόντα ανήκουν και σε διαφορετικά τροχιακά του οξυγόνου (p_x, p_y). Έτσι δεν είναι υποχρεωτικό να είναι αντιπαράλληλα. Αντίθετα σύμφωνα με τους κανόνες του Hund για το ιόν του οξυγόνου είναι παράλληλα. Κατά συνέπεια έχουμε σιδηρομαγνητική σύζευξη μεταξύ των δύο μαγνητικών ιόντων. Αυτό αναφέρεται ως ο δεύτερος κανόνας GKA: «Η υπερανταλλαγή σε γωνία 90° μεταξύ δύο ημι-γεμάτων τροχιακών είναι ασθενής σιδηρομαγνητική».

Η αλληλεπίδραση υπερανταλλαγής είναι πολύ ευαίσθητη στην γωνία και το μήκος του δεσμού. Σε ορισμένες περιπτώσεις (π.χ. $\beta\text{-MnS}$) μαζί με την σύζευξη σπιν-τροχιάς μπορεί να οδηγήσει σε όρο ανταλλαγής της μορφής $\vec{S}_i \times \vec{S}_j$ που ευνοεί κάθετη ($\uparrow \rightarrow$) σύζευξη (Dzyaloshinskii-Moriya).

1.3.2 Διπλή ανταλλαγή

Αυτό το είδος ανταλλαγής εμφανίζεται σε συστήματα μικτού σθένους και οδηγεί σε μεταλλική συμπεριφορά που χαρακτηρίζεται από σύνδεση μεταξύ αγωγιμότητας και σιδηρομαγνητικής τάξης. Το πιο τυπικό παράδειγμα εμφανίζεται στους περοβσκίτες του μαγγανίου μικτού σθένους που παρουσιάζουν ταυτόχρονη σιδηρομαγνητική-παραμαγνητική μετάβαση σε μετάβαση μετάλλου-μονωτή. Οι ενώσεις αυτές προέρχονται από την μερική νόθευση ενός «πατρικού υλικού» όπως π.χ. το LaMnO_3 (όπου τα μαγγάνια είναι τρισθενή) με δισθενές ιόν π.χ. $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ που φέρνει τα μαγγάνια σε κατάσταση μικτού σθένους $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$.

Η σύνδεση μεταξύ αγωγιμότητας και σιδηρομαγνητικής τάξης οφείλεται στο ότι η κινητικότητα των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας οδηγεί σε ένα σύστημα μικτού σθένους $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$ όπου οι καταστάσεις $\text{Mn}^{4+}\text{O}^{2-}\text{Mn}^{3+}$ και $\text{Mn}^{3+}\text{O}^{2-}\text{Mn}^{4+}$ είναι εκφυλισμένες ενεργειακά. Λόγω των ισχυρά σιδηρομαγνητικών ενδοατομικών αλληλεπιδράσεων (1^{st} κανόνας Hund) η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο αγωγιμότητας να μεταπηδήσει από ένα ιόν μαγγανίου σε ένα διπλανό του εξαρτάται από το αν οι μαγνητικές ροπές είναι παράλληλες. Έτσι η αγωγιμότητα συνδέεται με την μαγνητική τάξη. Αυτός ο μηχανισμός σε συνδυασμό με την ισχυρή σύζευξη τροχιάς-πλέγματος οδηγεί στην εμφάνιση του λεγόμενου φαινομένου της κολοσσιαίας μαγνητοαντίστασης (Colossal Magneto Resistance, CMR) εφόσον ένα μαγνητικό πεδίο μεταβάλλοντας την μαγνητική κατάσταση του συστήματος μπορεί να επηρεάζει την μετάβαση μετάλλου-μονωτή.

1.3.3 Ανταλλαγή Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY)

Απαντάται σε μεταλλικά συστήματα των στοιχείων μεταπτώσεως. Ο ενδιάμεσος είναι τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας. Μια εντοπισμένη μαγνητική πρόσμιξη προκαλεί περιοδική πόλωση του σπιν στα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας. Η σύζευξη αυτής της πόλωσης με κάποια άλλη μαγνητική ροπή σε απόσταση r δημιουργεί μια έμμεση αλληλεπίδραση της οποίας το πρόσημο εμφανίζει ταλαντώσεις σαν συνάρτηση της απόστασης r των μαγνητικών ατόμων.

Για σφαιρική επιφάνεια Fermi με ακτίνα k_F η σύζευξη RKKY είναι ανάλογη της ποσότητας

$$\frac{\cos(2k_F r)}{(k_F r)^3}$$

Γενικά ανάλογα με την απόσταση μεταξύ των ατόμων η αλληλεπίδραση μπορεί να είναι σιδηρομαγνητική ή αντισιδηρομαγνητική. Αυτό έχει βρει σημαντική εφαρμογή σε τεχνητές υπερδομές λεπτών στρωμάτων του τύπου:

$$(\text{σιδηρομαγνητικό στρώμα 1})/(\text{μη μαγνητικό στρώμα})/(\text{σιδηρομαγνητικό στρώμα 2})$$

όπου οι μαγνητικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των δύο στρωμάτων μεταφέρονται μέσω του μη μαγνητικού στρώματος. Με κατάλληλη προσαρμογή του πάχους του ενδιάμεσου μη μαγνητικού στρώματος (με ακρίβεια ενός ατομικού στρώματος !) μπορούμε να έχουμε ελεγχόμενη (ως προς το πρόσημο και την ισχύ) σύζευξη μεταξύ των δύο μαγνητικών στρωμάτων. Παραδείγματα τέτοιων σύνθετων υλικών είναι τα Fe/Cr/Fe, Co/Cu/Co, CoCrPtTa/Ru/CoCrPtTa.

1.4 Είδη μαγνητικής τάξης

Οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής μπορούν να οδηγήσουν στην ύπαρξη διαφορετικών ειδών μαγνητικής τάξης αλλά και αυθόρμητης μαγνήτισης σε μηδενικό πεδίο. Χωρίς αυτές όλα τα μαγνητικά υλικά θα ήταν διαμαγνητικά ή παραμαγνητικά και δεν θα μπορούσαν να έχουν καμία εφαρμογή. Πάνω από μια κρίσιμη θερμοκρασία η θερμική ενέργεια υπερσχύει της ενέργειας ανταλλαγής και τα υλικά συμπεριφέρονται σαν παραμαγνητικά. Τα βασικά είδη μαγνητικής τάξης είναι: i) ο σιδηρομαγνητισμός, ii) ο αντισιδηρομαγνητισμός, και iii) ο σιδηριμαγνητισμός.

1.4.1 Σιδηρομαγνητισμός (Ferromagnetism)

Ο σιδηρομαγνητισμός είναι ο βασικός μηχανισμός με τον οποίο συγκεκριμένα υλικά (όπως ο σίδηρος) σχηματίζουν μόνιμους μαγνήτες. Στη φυσική, διακρίνονται πολλά είδη μαγνητισμού. Ο σιδηρομαγνητισμός² είναι ο πιο ισχυρός τύπος. Είναι ο μόνος τύπος που δημιουργεί δυνάμεις που είναι αρκετά ισχυρές για να είναι αισθητές και είναι υπεύθυνος για τα συνηθισμένα φαινόμενα που εμφανίζονται στην καθημερινή ζωή. Η έλξη μεταξύ ενός μαγνήτη και ενός σιδηρομαγνητικού υλικού είναι η ιδιότητα του μαγνητισμού που πρωτοεμφανίστηκε στον αρχαίο κόσμο και σε μας σήμερα⁶.

Ιστορικά, ο όρος σιδηρομαγνητισμός χρησιμοποιήθηκε για οποιοδήποτε υλικό που μπορούσε να επιδείξει αυθόρμητη μαγνήτιση, μια καθαρή μαγνητική ροπή απουσία μαγνητικού πεδίου. Πιο πρόσφατα, όμως, διαφορετικές τάξεις από αυθόρμητη μαγνήτιση έχουν αναγνωριστεί, όταν υπάρχουν περισσότερα από ένα μαγνητικά ιόντα ανά πρωτογενή κυψελίδα (primitive cell) του υλικού, που οδηγεί σε έναν πιο αυστηρό όρο του σιδηρομαγνητισμού. Σύμφωνα με αυτόν τον όρο, ένα υλικό είναι σιδηρομαγνητικό μόνο αν όλα τα μαγνητικά του ιόντα προσθέτουν μια θετική συνεισφορά στην καθαρή μαγνήτιση.

Αν σε ένα στερεό όλα τα γειτονικά άτομα αλληλεπιδρούν με θετικές αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής που ευνοούν τον παράλληλο προσανατολισμό των μαγνητικών ροπών προκύπτει η λεγόμενη σιδηρομαγνητική τάξη και αυθόρμητη μαγνήτιση σε μηδενικό πεδίο. Αυτή διατηρείται μέχρι μια κρίσιμη θερμοκρασία (θερμοκρασία Curie, T_c) πάνω από την οποία η θερμική ενέργεια υπερσχύει της ενέργειας ανταλλαγής που κρατάει τις μαγνητικές παράλληλες και που είναι ανάλογη του ολοκληρώματος ανταλλαγής J και των αριθμών των πλησιέστερων γειτόνων z . Στον παρακάτω πίνακα δίνονται οι θερμοκρασίες Curie των τριών σιδηρομαγνητικών στοιχείων μετάπτωσης.

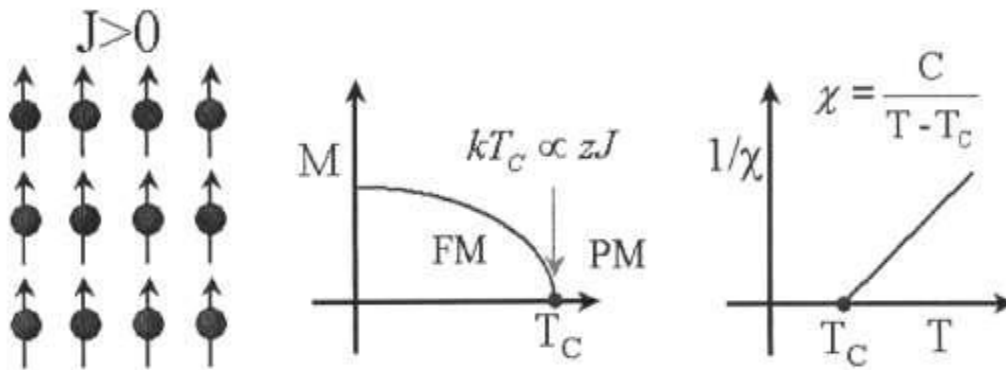
Πίνακας 1.1 Μαγνητίσεις κόρου και θερμοκρασίες Curie στα τυπικά σιδηρομαγνητικά στοιχεία μετάπτωσης

	$\mu_0 M_s(T)$	$T_c(^{\circ}\text{C})$
Fe	2.16	770
Co	1.81	1130
Ni	0.61	358

Πάνω από την θερμοκρασία Curie το υλικό δεν παρουσιάζει αυθόρμητη μαγνήτιση (παραμένουσα μαγνήτιση σε μηδενικό πεδίο). Βρίσκεται στην παραμαγνητική φάση και χαρακτηρίζεται από το νόμο Curie-Weiss^{4,7}.

$$\chi = \frac{C}{T - \theta} \quad (1.2)$$

όπου $\theta \approx T_c$. Σύμφωνα, με τον νόμο Curie-Weiss, πάνω από τη θερμοκρασία Curie οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής δεν παύουν να υπάρχουν, απλώς υπερिशχύει η θερμική ενέργεια.



Σχήμα 1.4 Σχηματική αναπαράσταση της μαγνητικής τάξης και της θερμοκρασιακής εξάρτησης της παραμένουσας μαγνήτισης και της επιδεκτικότητας σε ένα σιδηρομαγνητικό υλικό.

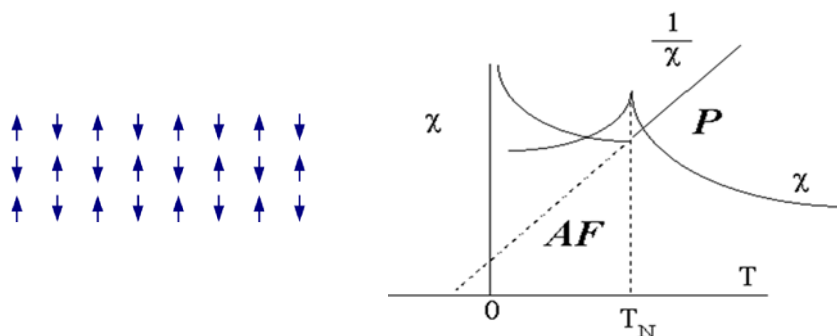
1.4.2 Αντισιδηρομαγνητισμός (Antiferromagnetism)

Σε υλικά που επιδεικνύουν αντισιδηρομαγνητισμό, οι μαγνητικές ροπές των ατόμων ή μορίων, σχετίζονται συνήθως με τα σπιν των ηλεκτρονίων, στοιχίζονται σε κανονική διάταξη με τα γειτονικά σπιν (σε διαφορετικά υποπλέγματα) δείχνοντας σε αντίθετες κατευθύνσεις, δηλαδή μια παρουσία διαταγμένου μαγνητισμού. Γενικά, αν οι ροπές των ευθυγραμμισμένων και των αντιευθυγραμμισμένων ιόντων εξισορροπούνται πλήρως έτσι ώστε να έχουν μηδενική καθαρή μαγνήτιση, παρά τη μαγνητική διάταξη, τότε είναι αντισιδηρομαγνήτης.

Αν σε ένα στερεό τα γειτονικά άτομα συνδέονται με αρνητικές αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής ενοείται ενεργειακά μια κατάσταση στην οποία το κάθε σπιν έχει γύρω του αντιπαράλληλα διατεταγμένα σπιν. Αυτή διατηρείται μέχρι μια κρίσιμη θερμοκρασία⁸ (T_N θερμοκρασία Néel) πάνω απ' την οποία η θερμική ενέργεια υπερिशχύει της ενέργειας ανταλλαγής που κρατάει τις μαγνητικές ροπές αντιπαράλληλες. Η επιδεκτικότητα εμφανίζει μέγιστο στην θερμοκρασία T_N . Πάνω από τη θερμοκρασία Néel το υλικό βρίσκεται στην παραμαγνητική φάση και χαρακτηρίζεται από τον νόμο Curie-Weiss

$$\chi = \frac{C}{T - \theta}$$

όπου η σταθερά $\theta \approx -T_N$.

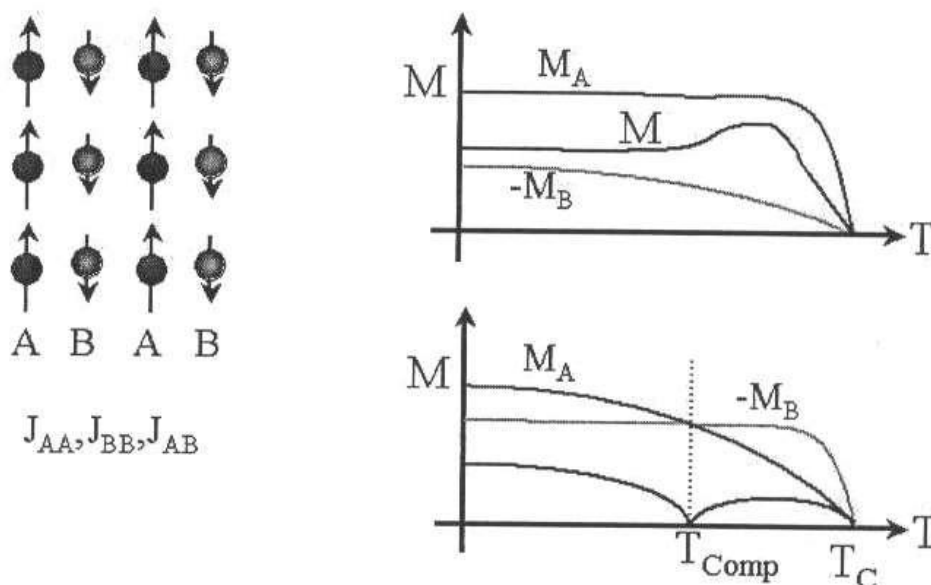


Σχήμα 1.5 Σχηματική αναπαράσταση της μαγνητικής τάξης και της θερμοκρασιακής εξάρτησης της επιδεκτικότητας σε ένα αντισιδηρομαγνητικό υλικό.

1.4.3 Σιδηριμαγνητισμός (Ferrimagnetism)

Τύπος μόνιμου μαγνητισμού στερεών, οφειλόμενος στην αυθόρμητη διευσθέτηση, ατόμων ή ιόντων. Άλλων η διευσθέτηση κατά τρόπο παράλληλο (όπως στον σιδηρομαγνητισμό) και άλλων κατά τρόπο αντιπαράλληλο (όπως στον αντισιδηρομαγνητισμό). Γενικά, αν κάποια από τα μαγνητικά ιόντα αφαιρούν θετική συνεισφορά από την καθαρή μαγνήτιση (αν είναι μερικώς αντισυθυραμμισμένα), τότε το υλικό είναι σιδηριμαγνητικό⁹. Τα σιδηριμαγνητικά υλικά είναι λιγότερο μαγνητικά από τα σιδηρομαγνητικά και χαρακτηρίζονται και αυτά από τη θερμοκρασία Curie.

Το όνομα «Ferrimagnetism» χρησιμοποιήθηκε από τον Néel για να περιγράψει την μαγνητική τάξη των φερριτών, αλλά φυσικά σε αυτήν την κατηγορία υπάγονται πολλά άλλα υλικά. Αυτά χαρακτηρίζονται από την ύπαρξη δύο διαφορετικών πλεγμάτων έστω A και B με αντιπαράλληλες ροπές. Αν ο αριθμός των κρυσταλλογραφικών θέσεων αλλά και το μέγεθος των μαγνητικών ροπών διαφέρει μεταξύ A και B η μαγνητική τάξη δίνει αυθόρμητη μαγνήτιση για θερμοκρασίες χαμηλότερες της θερμοκρασίας Curie.

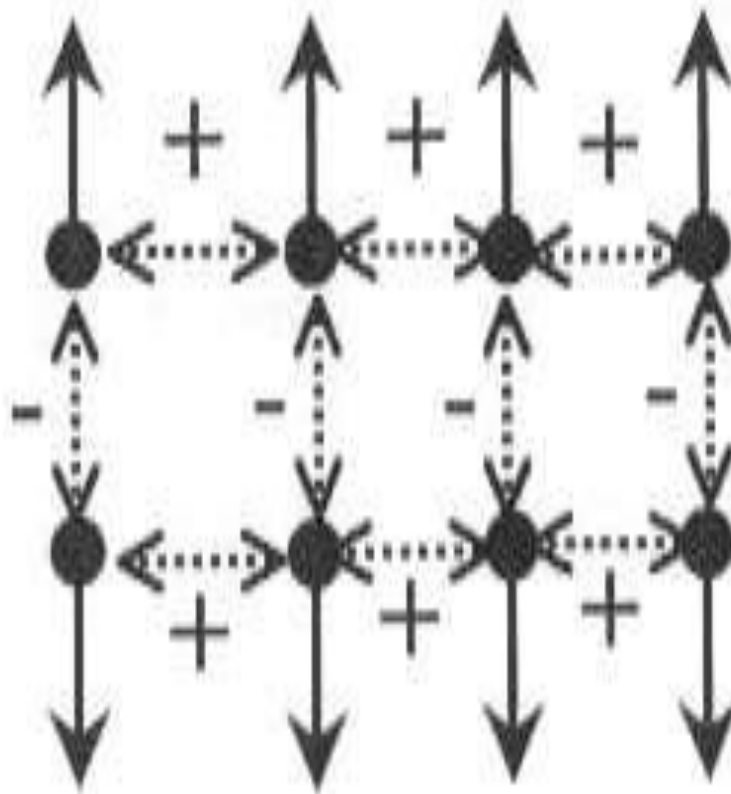


Σχήμα 1.6 Σχηματική αναπαράσταση της μαγνητικής τάξης και της πιθανόν ανώμαλης θερμοκρασιακής εξάρτησης της παραμένουσας μαγνήτισης σε ένα σιδηριμαγνητικό υλικό. Στο δεξιό μέρος έχουμε σημείο αντιστάθμισης των μαγνητικών ροπών των δύο υποπλεγμάτων στο οποίο $M=0$ χωρίς να έχει χαθεί η μαγνητική τάξη.

Η ακριβής μαγνητική τάξη καθορίζεται από τις σταθερές αλληλεπίδρασης J_{AA} , J_{AB} και J_{BB} . Η συνολική μαγνήτιση M είναι ίση με την διαφορά των μαγνητίσεων που αντιστοιχούν στα δύο υποπλέγματα M_A και M_B . Έτσι τυχόν διαφοροποιήσεις στην θερμοκρασιακή εξάρτηση μεταξύ του M_A και M_B μπορούν να δώσουν ανώμαλη εξάρτηση της αυθόρμητης μαγνήτισης από την θερμοκρασία. Αν υπάρχει θερμοκρασία για την οποία $M_A=M_B$ σε εκείνο ακριβώς το σημείο $M=0$ ενώ σε υψηλότερες και χαμηλότερες θερμοκρασίες έχουμε παραμένουσα μαγνήτιση. Αυτή η θερμοκρασία ονομάζεται σημείο αντιστάθμισης (Compensation Point).

1.4.4 Άλλα είδη μαγνητικής τάξης

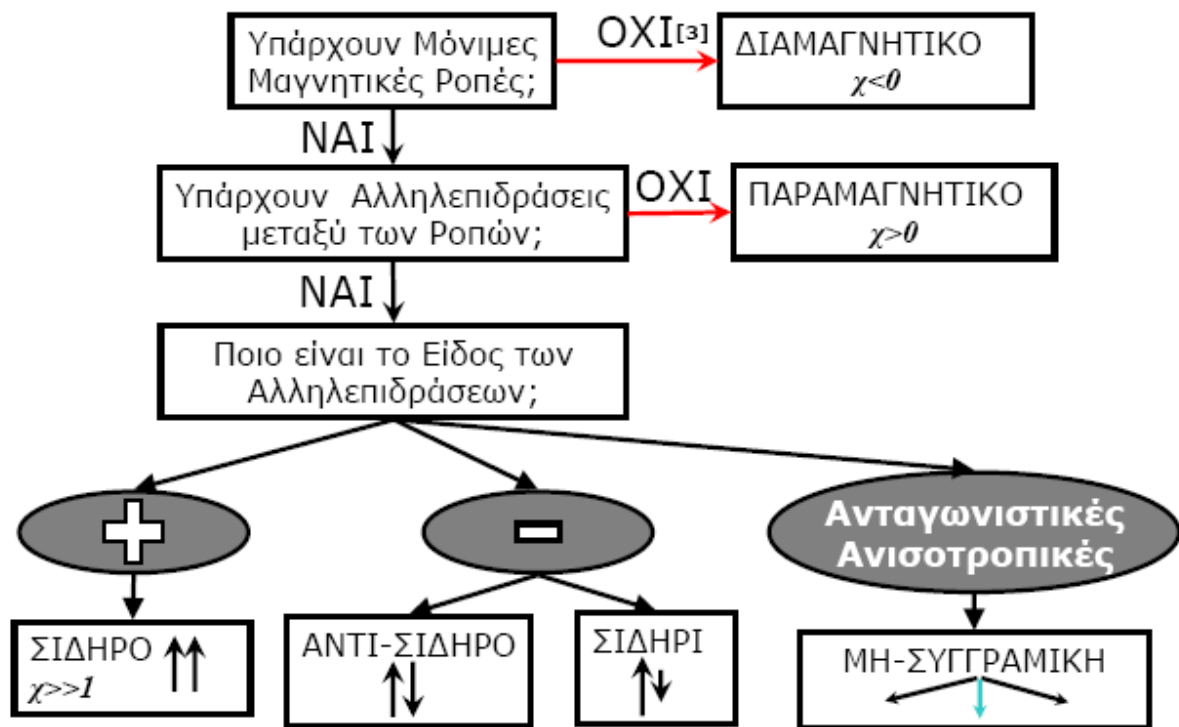
Πρέπει να τονιστεί ό,τι τα παραπάνω είδη μαγνητικής τάξης που αναφέρθηκαν δεν εξαντλούν όλα τα πιθανά είδη μαγνητικής που συναντώνται σε διάφορα υλικά. Για παράδειγμα εκτός από την σιδηρομαγνητική που αναφερθήκαμε μπορεί κανείς να φανταστεί και την εξής που προφανώς προϋποθέτει ανισοτροπικές σταθερές ανταλλαγής κατά μήκος διαφορετικών κρυσταλλογραφικών αξόνων.



Σχήμα 1.7 Ανισοτροπικές σταθερές ανταλλαγής.

Επίσης, υπάρχουν μη-συγγραμμικές διατάξεις των σπιν όπως π.χ η ελικοειδής μαγνήτιση (helimagnetic), η κεκαμμένη αντισιδηρομαγνητική (canted antiferromagnetic). Αυτές μπορεί να προκύψουν σαν αποτέλεσμα ανταγωνιστικών ή ανισοτροπικών αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής.

Τέλος, τα βασικά είδη μαγνητικής τάξης που αναφέρθηκαν συνοψίζονται στο παρακάτω σχήμα:

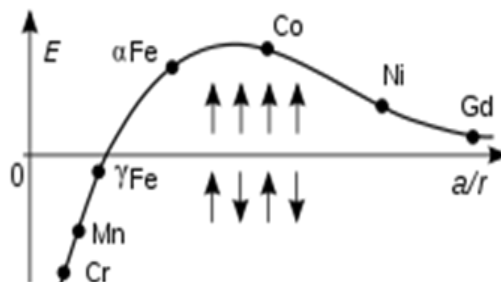


Σχήμα 1.8 Σύνοψη των πιθανών μαγνητικών δομών υπό μορφή λογικού διαγράμματος.

1.5 Καμπύλη Bethe-Slater

Το ολοκλήρωμα ανταλλαγής μπορεί να υπολογιστεί από την ενεργειακή διαφορά μεταξύ των χωρικά συμμετρικών και χωρικά αντισυμμετρικών καταστάσεων. Αν σχεδιάσουμε το ολοκλήρωμα ανταλλαγής, για τα στοιχεία μεταπτώσεως, σαν συνάρτηση της απόστασης κανονικοποιημένης ως προς την ακτίνα του ασυμπλήρωτου φλοιού παίρνουμε την λεγόμενη καμπύλη Bethe-Slater.

Η καμπύλη Bethe-Slater είναι μια γραφική αναπαράσταση της ενέργειας ανταλλαγής για μεταβατικά μέταλλα συναρτήσει του λόγου της διατομικής απόστασης a προς την ακτίνα r του κελύφους τριών ηλεκτρονίων¹⁰. Η καμπύλη δείχνει γιατί ορισμένα μέταλλα είναι σιδηρομαγνητικά και άλλα αντισιδηρομαγνητικά.

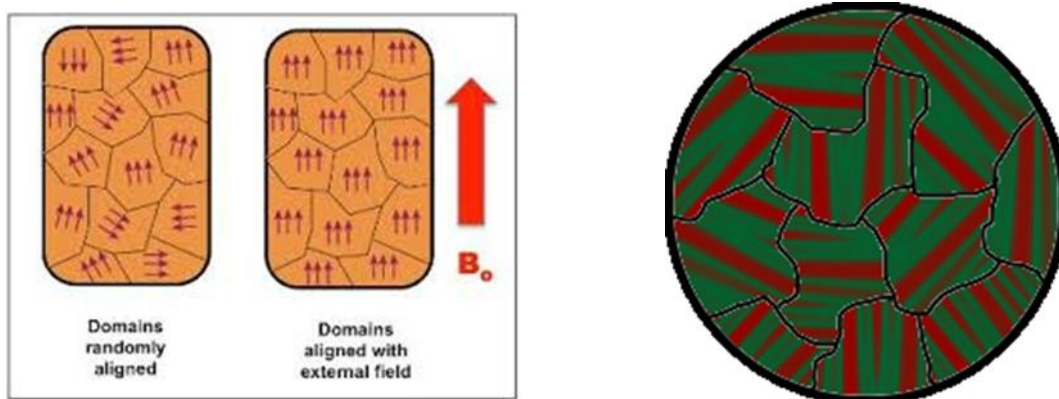


Σχήμα 1.9 Καμπύλη Bethe-Slater. Για τιμές της ενέργειας ανταλλαγής μεγαλύτερες από το μηδέν τα υλικά είναι σιδηρομαγνητικά ενώ για τιμές της ενέργειας ανταλλαγής μικρότερες του μηδέν τα υλικά είναι αντισιδηρομαγνητικά.

1.6 Μαγνητικές Περιοχές

Μακροσκοπικά η μαγνήτιση είναι ένα φαινόμενο που οφείλεται στο εξωτερικό επιβαλλόμενο πεδίο. Η θεωρία των μαγνητικών περιοχών εξηγεί πως μεταβάλλεται η μαγνήτιση μακροσκοπικά μέσα στο υλικό.

Σε ένα σιδηρομαγνητικό υλικό οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής επικρατούν σε μικρές αποστάσεις ενώ σε μεγαλύτερες αποστάσεις επικρατούν οι μαγνητικές διπολικές. Σαν αποτέλεσμα το υλικό δεν είναι μαγνητισμένο ομοιόμορφα σε όλο τον όγκο του, αλλά χωρίζεται στις λεγόμενες μαγνητικές περιοχές (περιοχές Weiss ή magnetic domains)¹¹ (Σχήμα 1.10). Στις περιοχές αυτές οι μαγνητικές ροπές είναι πλήρως προσανατολισμένες ώστε να ελαχιστοποιείται η ενέργεια ανταλλαγής ενώ η διεύθυνση της μαγνήτισης διαφέρει από περιοχή σε περιοχή έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται η μαγνητοστατική ενέργεια. Οι διεπιφάνειες μεταξύ των μαγνητικών περιοχών ονομάζονται μαγνητικά τοιχώματα (domain walls)¹².



Σχήμα 1.10 Σχηματική αναπαράσταση μαγνητικών περιοχών. Αριστερά απεικονίζονται οι μαγνητικές περιοχές ενός δοκιμίου πριν και μετά τη μαγνήτιση. Δεξιά απεικονίζονται οι μαγνητικές περιοχές που εμφανίζονται σε μεταλλική επιφάνεια (λήψη από μικρογραφία Kerr), με κόκκινες και πράσινες λωρίδες που υποδηλώνουν αντίθετες κατευθύνσεις¹¹.

Η διαδικασία της μαγνήτισης, το σχήμα του βρόχου υστέρησης και το μέγεθος του συνεκτικού πεδίου εξαρτώνται από τους μηχανισμούς της πυρήνωσης νέων μαγνητικών περιοχών και τη μετακίνηση των τοιχωμάτων τους⁵.

Γενικότερα οι μαγνητικές περιοχές είναι περιοχές σε ένα σιδηρομαγνητικό υλικό στις οποίες η κατεύθυνση της μαγνήτισης είναι γενικά ομοιόμορφη. Όταν δημιουργούνται οι μαγνητικές περιοχές, ο προσανατολισμός της μαγνήτισης σε κάθε περιοχή και το μέγεθος της περιοχής προσδιορίζονται από τη μαγνητοστατική ενέργεια, την ενέργεια της κρυσταλλικής ανισοτροπίας, τη μαγνητοελαστική ενέργεια και την ενέργεια του τοιχώματος της μαγνητικής περιοχής. Η δομή των μαγνητικών περιοχών έχει τέτοια μορφή ώστε να ελαχιστοποιούνται όλες οι παραπάνω ενέργειες¹³.

Τα μαγνητικά σωματίδια μπορεί και να χαρακτηρίζονται από μια μονή μαγνητική περιοχή (single domain particles)¹⁴. Αυτό συμβαίνει όταν χρειάζεται περισσότερη ενέργεια για να δημιουργηθεί ένα τοίχωμα μαγνητικής περιοχής από το να συντηρηθεί η μαγνητοστατική μιας κατάστασης μονής μαγνητικής περιοχής. Γι' αυτό το λόγο είναι σημαντικό να γνωρίζουμε το μέγεθος κάτω απ' το οποίο ένα σωματίδιο αποτελείται από μια μαγνητική περιοχή. Η ακτίνα ενός τοιχώματος μονής μαγνητικής περιοχής (r_c) θα πρέπει να είναι μεγαλύτερη από την ακτίνα του σωματιδίου (r) που θα περιέχεται στη μαγνητική περιοχή, η οποία με τη σειρά θα πρέπει να είναι μεγαλύτερη από την κρίσιμη τιμή της ακτίνας (r_0) του μεγέθους του νανοσωματιδίου που δημιουργεί το υπερπαραμαγνητικό όριο¹³. Δηλαδή θα πρέπει να ισχύει $r_0 < r < r_c$.

Για ένα σωματίδιο μονής περιοχής, η διαδικασία μαγνήτισης πραγματοποιείται μέσω της σύγχρονης περιστροφής των σπιν¹⁵. Τα σωματίδια με μέγεθος κοντά στην ακτίνα r έχουν

συνήθως συνεκτικό πεδίο. Καθώς το μέγεθος των σωματιδίων μικραίνει αρκετά κάτω από μια κρίσιμη ακτίνα r_0 τα σπιν επηρεάζονται από τις θερμικές διακυμάνσεις και ένα τέτοιο σωματίδιο ονομάζεται υπερπαραμαγνητικό.

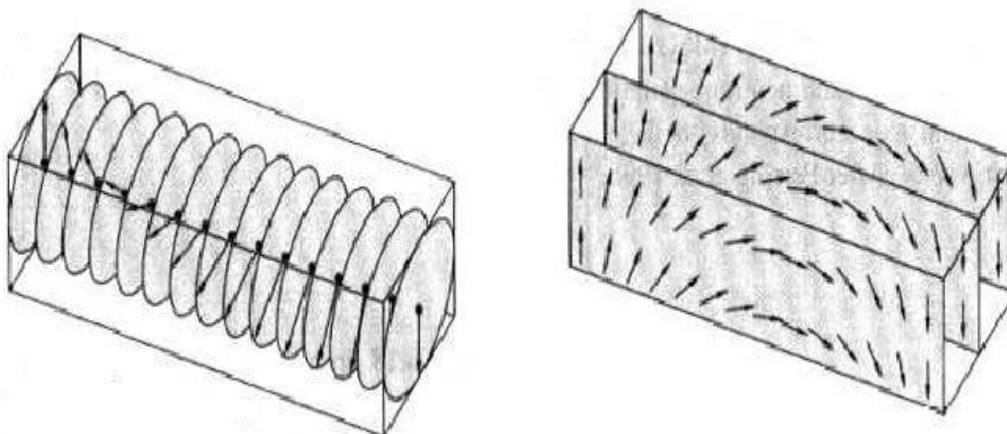
1.7 Μαγνητικά τοιχώματα

Το γεγονός ότι μέσα στα σιδηρομαγνητικά υλικά είναι δυνατή η ύπαρξη μαγνητικών περιοχών έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία μαγνητικών τοιχωμάτων, τα οποία αποτελούν τη διεπιφάνεια μεταξύ δύο μαγνητικών περιοχών των οποίων ο μαγνητισμός σχηματίζει κάποια γωνία. Είναι στην ουσία μια περιοχή μετάβασης όπου ο μαγνητισμός αλλάζει σταδιακά, ώστε να υπάρχει ομαλή μετάβαση από τον μαγνητισμό της μιας περιοχής στην άλλη. Στα συνήθη μαγνητικά υλικά αυτές οι διεπιφάνειες δεν περιορίζονται σε ένα ατομικό επίπεδο αλλά έχουν κάποιο πεπερασμένο πάχος δ μέσα στο οποίο η διεύθυνση της μαγνήτισης μεταβάλλεται σταδιακά από τη διεύθυνση της μαγνήτισης που αντιστοιχεί στην μια περιοχή σε αυτήν της άλλης. Το πάχος των μαγνητικών τοιχωμάτων εξαρτάται από την ενέργεια ανταλλαγής της οποίας η μείωση ευνοείται από τοιχώματα μεγάλου πάχους και την ενέργεια ανισοτροπίας της οποίας η μείωση ευνοείται από τοιχώματα μικρού πάχους. Το πάχος, δ , των μαγνητικών τοιχωμάτων μπορεί να υπολογιστεί από τη σχέση:

$$\delta \propto \sqrt{\frac{E_{ex}}{K_u}} \quad (1.3)$$

όπου E_{ex} είναι η ενέργεια ανταλλαγής και K_u η σταθερά μονοαξονικής ανισοτροπίας.

Σήμερα η σύγχρονη θεωρία των μαγνητικών περιοχών αποδίδει την υστέρηση στην μετακίνηση τοιχωμάτων¹⁶. Τα τοιχώματα καθορίζονται από τον σχετικό προσανατολισμό της μαγνήτισης εκατέρωθεν αυτού. Τα πιο διαδεδομένα τοιχώματα είναι αυτά του Bloch και του Néel.



Σχήμα 1.11 Μαγνητικά τοιχώματα τύπου Bloch (αριστερά) και τύπου Néel (δεξιά).

Τα τοιχώματα Bloch συναντώνται συνήθως σε δοκίμια που έχουν μεγάλες και τις τρεις διαστάσεις τους και οι ενεργειακοί όροι ανισοτροπίας και ανταλλαγής παίζουν σημαντικό ρόλο στους υπολογισμούς της δομής και του πάχους τους (σχέση (1.3)). Αντίθετα τα τοιχώματα Néel σχηματίζονται μόνο σε λεπτά υμένα καθώς παράγουν μεγάλα ποσοστά ενέργειας απομαγνήτισης μέσα στον όγκο του τοιχώματος. Στον υπολογισμό της δομής και του πάχους των τοιχωμάτων Néel πρέπει να λάβουμε υπόψη και την μαγνητοστατική

ενέργεια καθώς παίζει καθοριστικό ρόλο στην δομή του τοιχώματος λόγω των «πόλων» που δημιουργούνται στην τομή του τοιχώματος με τις επιφάνειες του υμενίου.

Τα τοιχώματα των μαγνητικών περιοχών μπορούν να επιφέρουν αρνητικά ή θετικά αποτελέσματα στο υλικό ανάλογα με την εφαρμογή του. Τα μαγνητικά σωματίδια, για παράδειγμα, που χρησιμοποιούνται στην μαγνητική εγγραφή δεν πρέπει να περιέχουν τοιχώματα μαγνητικών περιοχών, διότι τα τοιχώματα αυτά μειώνουν το συνεκτικό πεδίο και λειτουργούν σαν πηγή θορύβου. Επίσης τα σωματίδια που χρησιμοποιούνται ως μόνιμοι μαγνήτες δεν θα πρέπει να έχουν τοιχώματα μαγνητικής περιοχής, διότι λόγω αυτών μπορούν πολύ εύκολα να απομαγνητιστούν. Από την άλλη πλευρά όταν τα σωματίδια χρησιμοποιούνται για την δημιουργία μιας ελαστικής μαγνητικής ασπίδας τότε τα τοιχώματα μαγνητικών περιοχών θα πρέπει να υπάρχουν στα σωματίδια.

1.8 Ενέργεια ανταλλαγής (exchange energy)

Το φαινόμενο με το οποίο οι μεμονωμένες ατομικές μαγνητικές ροπές θα προσπαθήσουν να ευθυγραμμίσουν όλες τις άλλες ατομικές μαγνητικές ροπές εντός του υλικού με το ίδιο είναι γνωστό ως αλληλεπίδραση ανταλλαγής (Aharoni, 2000)¹⁷.

Η ενέργεια ανταλλαγής (E_{ex}) είναι η ενέργεια που απελευθερώνεται όταν τα παράλληλα ηλεκτρόνια που ανήκουν σε ένα εκφυλισμένο (ίδια ενέργεια) υποφλοιό γίνονται για τα παράλληλα σπιν. Η ενέργεια ανταλλαγής μεταξύ δύο γειτονικών μαγνητικών ροπών μ_i και μ_j περιγράφονται συνήθως από:

$$E_{ex}^{ij} = -J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.4)$$

όπου E_{ex}^{ij} είναι η ενέργεια ανταλλαγής μεταξύ δύο γειτονικών μαγνητικών ροπών, J_{ij} το ολοκλήρωμα ανταλλαγής που προέρχεται από τη λειτουργία κυμάτων για δύο ηλεκτρόνια. Αν η κυματοσυνάρτηση $\Psi(r_1, r_2)$ είναι αντισυμμετρική, $|\mu|$ μια κανονικοποιημένη μαγνητική ροπή και $\vec{S}$ το μοναδιαίο διάνυσμα της κατεύθυνσης της μαγνητικής ροπής, τότε:

$$\vec{S} = \frac{\vec{\mu}}{|\mu|} \quad (1.5)$$

Συνεπώς, η ενέργεια ανταλλαγής για ένα σύστημα σωματιδίων υπό την προϋπόθεση ότι η ενέργεια ανταλλαγής είναι βραχύβια και στη συνέχεια ενεργεί μόνο σε άμεσους γείτονες, είναι:

$$E_{ex} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \in N_i} E_{ex}^{ij} \quad (1.6)$$

Το N χρησιμοποιήθηκε για να αντιπροσωπεύει τους πλησιέστερους γείτονες i σε αθροίσματα N_i . Η αξία του J_{ij} προέρχεται πειραματικά και εκφράζεται ως συνάρτηση της επιφάνειας A .

Η τιμή του J_{ij} είναι σημαντική. Αν είναι θετικό, υποδεικνύει ότι το υλικό παρουσιάζει σιδηρομαγνητική συμπεριφορά και ότι η ενέργεια ανταλλαγής είναι ελάχιστη όταν δύο γειτονικές ροπές βρίσκονται σε παράλληλη ευθυγράμμιση. Τα αντισιδηρομαγνητικά υλικά έχουν αρνητικό J_{ij} και ως εκ τούτου έχουν μια ελάχιστη ενέργεια ανταλλαγής όταν ευθυγραμμίζονται αντιπαράλληλα.

Τέλος, η ενέργεια ανταλλαγής είναι μια σταθερά, η τιμή της οποίας διαφέρει από υλικό σε υλικό. Στον παρακάτω πίνακα δίνονται οι τιμές της ενέργειας ανταλλαγής μεταξύ μαγνητικών ροπών, σημαντικών μεταβατικών μετάλλων¹⁷.

Πίνακας 1.2 Ενέργεια ανταλλαγής σημαντικών μεταβατικών μετάλλων.

Υλικό	Σύμβολο	Ενέργεια ανταλλαγής (J)
Σίδηρος	Fe	-1.21×10^{-21}
Κοβάλτιο	Co	-5.15×10^{-21}
Νικέλιο	Ni	-4.46×10^{-21}

1.9 Πόλωση ανταλλαγής

Όταν υλικά με σιδηρομαγνητικές και αντισιδηρομαγνητικές διεπιφάνειες ψυχθούν μέχρι τη θερμοκρασία Néel (T_N) του αντισιδηρομαγνητικού υλικού (με θερμοκρασία Curie (T_C) του σιδηρομαγνητικού υλικού μεγαλύτερη από τη θερμοκρασία Néel) τότε προκαλείται ένα είδος ανισοτροπίας (exchange bias) στο σιδηρομαγνητικό υλικό¹⁸.

Η ανισοτροπία αυτή, ανακαλύφθηκε το 1956 από τους Meiklejohn και Bean καθώς μελετούσαν σωματίδια κοβαλτίου εκτιθέμενα στο μονοξείδιο του κοβαλτίου (CoO), που τα ίδια αυτά σωματίδια έχουν δημιουργήσει¹⁹. Χαρακτηριστικά παρατήρησαν ότι υπήρξε μια μετατόπιση στο κέντρο του βρόχου υστέρησης των σωματιδίων από την κανονική θέση $H=0$ σε $H \neq 0$. Από τότε το φαινόμενο αυτό σε πολλά διαφορετικά συστήματα, τα οποία περιέχουν σιδηρομαγνητικές-αντισιδηρομαγνητικές διεπιφάνειες όπως σε μικρά σωματίδια, σε ομοιογενή υλικά¹⁸, σε σιδηρομαγνητικά υμένα που είναι επιστρωμένα σε αντισιδηρομαγνητικούς κρυστάλλους²⁰ καθώς και σε λεπτά υμένα²¹. Στις πιθανές εφαρμογές του φαινομένου αυτού περιλαμβάνονται οι μόνιμοι μαγνήτες²², τα μαγνητικά μέσα εγγραφής²³ ή σταθεροποιητές της μαγνητικής περιοχής σε ανισοτροπική μαγνητοαντίσταση²⁴. Η πόλωση ανταλλαγής χρησιμοποιείται ευρέως στις κεφαλές ανάγνωσης με μαγνητοαντίσταση²⁵ αλλά έχει επίσης προταθεί και ως μέσο σταθεροποίησης της εγγεγραμμένης πληροφορίας ενάντια στις θερμικές διακυμάνσεις στα μαγνητικά μέσα εγγραφής²⁶.

Φαινομενολογικά λοιπόν, ενδοεπιφανειακή σύζευξη εξαιτίας της ανισοτροπίας ανταλλαγής παρατηρείται όταν ψύχεται ένα σιδηρομαγνητικό-αντισιδηρομαγνητικό σύστημα, παρουσία ενός στατικού μαγνητικού πεδίου από μια θερμοκρασία πάνω από τη θερμοκρασία Néel, αλλά κάτω από τη θερμοκρασία Curie ($T_N < T < T_C$) μέχρι θερμοκρασίες μικρότερες από τη θερμοκρασία Néel ($T < T_N$). Ο βρόχος υστέρησης του συστήματος σε θερμοκρασίες μικρότερες από τη θερμοκρασία Néel μετά τη διαδικασία ψύξης υπό πεδίο, μετατοπίζεται κατά μήκος του άξονα του πεδίου γενικά προς τα αρνητικά πεδία ($H_E < 0$). Πρόσφατα όμως έχει βρεθεί ότι μπορεί να μετατοπιστεί και προς τα θετικά ($H_E > 0$) ο βρόχος υστέρησης εάν τα δείγματα εκτεθούν σε ψύξη υπό μεγάλα πεδία²⁷. Η μετατόπιση αυτή του βρόχου υστέρησης επίσης έχει συνεκτικό πεδίο (H_c) μετά τη διαδικασία ψύξης υπό πεδίο. Τα δύο αυτά φαινόμενα εξαφανίζονται για θερμοκρασίες κοντά στη θερμοκρασία Néel του αντισιδηρομαγνητικού υλικού επιβεβαιώνοντας πως η ανισοτροπία αυτή εμφανίζεται εξαιτίας του αντισιδηρομαγνητικού υλικού.

Σε ένα σύστημα μαλακού σιδηρομαγνητικού/αντισιδηρομαγνητικού υλικού, στο οποίο η πόλωση ανταλλαγής εμφανίζεται με την ψύξη υπό πεδίο μέχρι τη θερμοκρασία Néel, μια προτιμητέα κατεύθυνση της μαγνήτισης υπάρχει στη διεπιφάνεια. Στην εφαρμογή ενός ασθενούς ή μέτριου πεδίου σε ένα πόλωσης ανταλλαγής το μαλακό μαγνητικό υλικό τείνει να ακολουθήσει το υποκείμενο πεδίο στη σύζευξη στη διεπιφάνεια, η μαγνήτιση του δηλαδή

τείνει να στραφεί προς το εφαρμοσμένο πεδίο στη διεπιφάνεια. Η στροφή αυτής της μαγνήτισης συμβαίνει μόνο στο μαγνητικά μαλακό υλικό (σιδηρομαγνητικό) γιατί σε αυτό η μαγνητική ανισοτροπία είναι μικρότερη. Δεν συμβαίνει στο αντισιδηρομαγνητικό υλικό γιατί το εξωτερικό πεδίο δεν ασκεί ροπή στρέψης στις μαγνητικές του ροπές επειδή αυτές έχουν άθροισμα μηδέν και συγκρατούνται σε μια συγκεκριμένη κρυσταλλογραφική κατεύθυνση λόγω της μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας.

Εκτός από το γεγονός ότι η συμμετρία διαλύεται στην εμφάνιση της μονοαξονικής ανισοτροπίας ($H_E \neq 0$), διάφορα άλλα συμπληρωματικά χαρακτηριστικά σχετίζονται με την πόλωση της ανταλλαγής. Μεταξύ αυτών των χαρακτηριστικών είναι η θερμοκρασία φραγμού (T_B), πάνω απ' την οποία η πόλωση ανταλλαγής εξαφανίζεται. Ένα άλλο σημαντικό χαρακτηριστικό της πόλωσης ανταλλαγής εξαρτάται από τον αριθμό n των μετρήσεων όσο αυξάνονται οι μετρήσεις το συνεκτικό πεδίο μικραίνει γεγονός που επιδεικνύει ότι διεπιφάνεια βρίσκεται σε μια μετασταθή ισορροπία. Το φαινόμενο μνήμης αποτελεί ένα από τα χαρακτηριστικά της πόλωσης ανταλλαγής. Κατά το φαινόμενο αυτό το σύστημα «θυμάται» την θερμοκρασία στην οποία το πεδίο ψύχθηκε. Επίσης ένα ακόμη πολύ σημαντικό χαρακτηριστικό που παρατηρείται στα συστήματα που εμφανίζουν πόλωση ανταλλαγής είναι η αύξηση του συνεκτικού πεδίου για θερμοκρασίες μικρότερες της θερμοκρασίας φραγμού²⁸ ($T < T_B$).

Ο μικροσκοπικός ορισμός της πόλωσης ανταλλαγής είναι ακόμα ανοιχτός στην έρευνα εξαιτίας της μεγάλης ποικιλομορφίας των συστημάτων στα οποία εμφανίζεται αλλά και λόγω της έλλειψης της ακριβούς πληροφορίας της δομής των σπιν στην επιφάνεια. Γενικά, θεωρείται ότι η πόλωση σχετίζεται με τις ατέλειες στην αντισιδηρομαγνητική διάταξη, οι οποίες οδηγούν στη δημιουργία μη αντισταθμισμένων σπιν στο εσωτερικό των αντισιδηρομαγνητικών υλικών ή στη διεπιφάνειά του.

Τέλος, θα πρέπει να σημειωθεί, άλλο ένα φαινόμενο το οποίο συναντάται συχνά όταν ένα αντισιδηρομαγνητικό υλικό είναι σε στενή εγγύτητα με ένα σιδηρομαγνητικό υλικό. Το φαινόμενο αυτό λέγεται ασθενής σιδηρομαγνητισμός και συναντάται όταν μη αντισταθμισμένα σπιν υπάρχουν στην επιφάνεια του αντισιδηρομαγνητικού υλικού σε χαμηλές θερμοκρασίες²⁹. Το φαινόμενο αυτό τυγχάνει να είναι αλληλένδετο με το φαινόμενο της πόλωσης ανταλλαγής καθώς προϋποθέτει την ύπαρξη ενός σιδηρομαγνητικού/αντισιδηρομαγνητικού συστήματος.

1.10 Αλληλεπιδράσεις Dzyaloshinskii-Moriya (DMI)

Η χειραλικότητα (chirality) είναι μια μορφή ασυμμετρίας του συστήματος. Εάν η ατομική δομή ενός μαγνήτη στερείται αναστροφή συμμετρίας τους καλούμε χειραλικούς (chiral) μαγνήτες. Η χειραλικότητα εκφράζεται μετά από το διάγραμμα φάσης που δείχνει επιπλέον chiral φάσεις. Σε αυτές τις φάσεις η μαγνήτιση κατά κάποιο τρόπο είναι περιστροφική (π.χ. ελικοειδής). Ποιος μηχανισμός είναι υπεύθυνος για όλες αυτές τις φάσεις;

Το 1960 ο Dzyaloshinskii κατασκεύασε ένα μοντέλο για να περιγράψει το σιδηρομαγνητισμό^{30,31}. Βασιζόμενος στη συμμετρία εισήγαγε ένα ασύμμετρο όρο ο οποίος αργότερα ονομάστηκε αλληλεπίδραση Dzyaloshinskii-Moriya. Το όνομα Moriya συνδέθηκε σε αυτόν τον όρο, όταν βρήκε τον το μηχανισμό πίσω από αυτήν αλληλεπίδραση που βασίζεται εν μέρη στη σύζευξη σπιν-τροχιάς³². Χωρίς να εισέλθουμε σε λεπτομέρειες μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η αλληλεπίδραση Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) προκαλείται από την έλλειψη συμμετρίας αναστροφής μιας ένωσης και μια ισχυρή σύζευξη σπιν-τροχιάς.

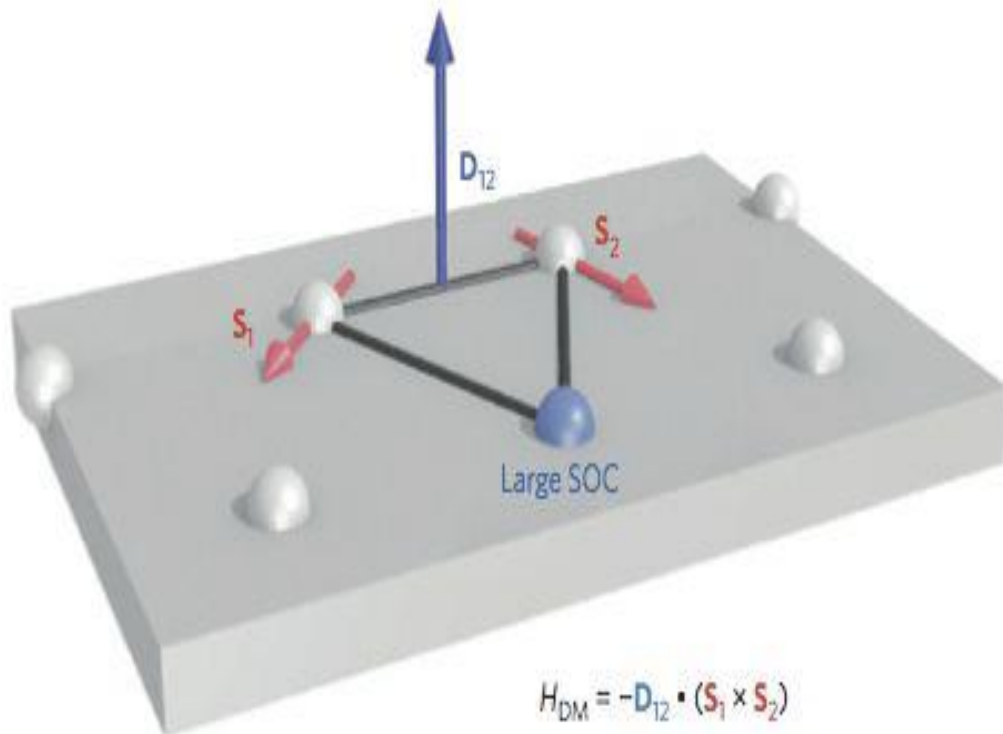
Επίσης, η DMI³³ είναι γνωστή και ως αντισυμμετρική αλληλεπίδραση ανταλλαγής (antisymmetric exchange interaction)³⁴. Η αλληλεπίδραση αυτή και ο αντίστοιχος ενεργειακός όρος εμφανίζονται σε συστήματα όπου η συμμετρία αναστροφής είναι «σπασμένη» λόγω του

κρυστάλλου του υλικού και είναι αποτέλεσμα του συνδυασμού των φαινομένων σπιν-τροχιάς και υπερανταλλαγής. Πιο συγκεκριμένα το φαινόμενο αυτό συναντάται σε υλικά όπου ο κρύσταλλος είναι δομημένος με τέτοιο τρόπο ώστε τα σπιν των ατόμων να είναι συζευγμένα με έμμεσο τρόπο μέσω ενός ενδιάμεσου ατόμου ή συνόλου ατόμων μέσω ενός φαινομένου γνωστού ως υπερανταλλαγή³⁵. Επίσης αποτελεί πηγή ασθενούς σιδηρομαγνητικής συμπεριφοράς σε αντισιδηρομαγνήτες. Ο αντίστοιχος ενεργειακός όρος για την αλληλεπίδραση DMI είναι:

$$\mathcal{H}_{\text{DM}} = -\vec{D}_{12} \cdot (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2) \quad (1.7)$$

όπου $\vec{D}_{12}$ είναι η σταθερά ισχύος της αλληλεπίδρασης DMI, η οποία είναι διάνυσμα του οποίου το μέτρο και η κατεύθυνση εξαρτάται από τον κρύσταλλο του υλικού. $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$ είναι τα ατομικά σπιν.

Στο σχήμα 1.12 υπάρχει μια αλληλεπίδραση DMI που προκύπτει από την αλληλεπίδραση δύο ατομικών σπιν με ένα γειτονικό άτομο έχοντας μεγάλη σύζευξη σπιν-τροχιάς σε ένα λεπτό φιλμ. Η προκύπτουσα αλληλεπίδραση DMI προκύπτει από ένα εξωτερικό σημείο από το επίπεδο του ατόμου. Ο ίδιος ο μηχανισμός είναι υπεύθυνος για τις διεπιφανειακές αλληλεπιδράσεις DMI μεταξύ λεπτού σιδηρομαγνητικού στρώματος κι ενός μη-μαγνητικού στρώματος με μια μεγάλη σύζευξη σπιν-τροχιάς. Εδώ στο σημείο διεπαφής μεταξύ των δύο στρώματων, ο τριγωνικός μηχανισμός παράγει μια αλληλεπίδραση DMI για τα ενδιάμεσα σπιν $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$. Το διάνυσμα της αλληλεπίδρασης DMI, $\vec{D}_{12}$, είναι κάθετο στο τρίγωνο.



Σχήμα 1.12 Σχηματική επεξήγηση της αλληλεπίδρασης DMI για δύο σπιν $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$.

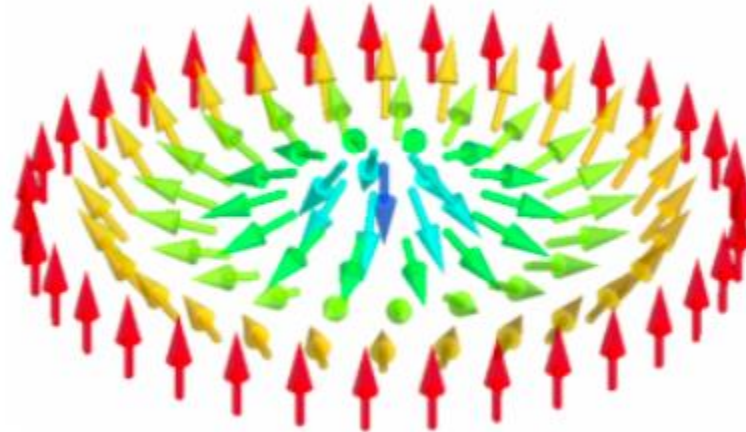
Ξεκινώντας με μια σιδηρομαγνητική κατάσταση όπου όλα τα σπιν είναι κοντά: $\vec{S}_1 \parallel \vec{S}_2$, υποθέτουμε ότι μια ισχυρή σύζευξη σπιν-τροχιάς προκαλεί μια αλληλεπίδραση DMI. Η προκύπτουσα μαγνητική δομή εξαρτάται από την κατεύθυνση του διανύσματος $\vec{D}$, που με τη σειρά του εξαρτάται από τον τρόπο που η συμμετρία στην ένωση είναι σπασμένη. Λαμβάνονται διαφορετικές ελικοειδείς δομές για διαφορετικές αλληλεπιδράσεις DMI.

Καλούμε το διάνυσμα που συνδέει τις θέσεις των σπιν $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$, $\vec{R}_{12}$. Η ενέργεια του συστήματος είναι ελαχιστοποιημένη είτε $\vec{R}_{12} \perp \vec{D}_{12}$ είτε $\vec{R}_{12} \parallel \vec{D}_{12}$. Εάν $\vec{R}_{12} \perp \vec{D}_{12}$, η αλληλεπίδραση DMI γέρνει το $\vec{S}_1$ γύρω από το $\vec{D}_{12}$ σε σχέση με το $\vec{S}_2$. Η περιστροφή αυτή οδηγεί τελικά στη διαμόρφωση του σχήματος;



Σχήμα 1.13 Σχηματική αναπαράσταση της διαμόρφωσης του συστήματος εάν $\vec{R}_{12} \perp \vec{D}_{12}$.

Εάν ωστόσο $\vec{R}_{12} \parallel \vec{D}_{12}$ οδηγούμαστε στη διαμόρφωση του σχήματος:



Σχήμα 1.14 Σχηματική αναπαράσταση της διαμόρφωσης του συστήματος εάν $\vec{R}_{12} \parallel \vec{D}_{12}$.

Οι διαμορφώσεις που απεικονίζονται στα σχήματα 1.13 και 1.14 ονομάζονται σκυρμιόνια και θα αναφερθούμε εκτενώς σ' αυτά στο 2^ο κεφάλαιο.

Βιβλιογραφία

- [1] W. Heisenberg. Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik, *Zeitschrift für Physik* **V38**, #6-7 (June 1926), pp. 411-426 DOI 10.1007/BF01397160
- [2] Soshin, Chikazumi, Physics of Ferromagnetism. Oxford University Press, New York, 1997, p.125, ISBN 0-19-851776-9
- [3] Chikazumi, Söshin (2009), Physics of Ferromagnetism, English edition prepared with the assistance of C.D. Graham Jr (2nd edition), Oxford University Press, page 118-130 ISBN 9780199564811
- [4] Παναγιωτόπουλος Ι., «Κεφάλαιο 3: Αλληλεπίδραση ανταλλαγής και μαγνητική τάξη», σελ. 29-42, βιβλίο *Μαγνητικά Υλικά*, Εκδόσεις Α.Γ. Πνευματικός, Αθήνα 2010
- [5] Τόμου Αφ., «Θεωρητικό Μέρος» σελ. 24, Διδακτορική Διατριβή *Μελέτη των μαγνητικών ιδιοτήτων και αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής σε νανοσύνθετα μαγνητικά υλικά*, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα 2013
- [6] Bozorth, Richard M., *Ferromagnetism*, 1st published 1951, Reprinted 1993 by IEEE Press, New York as a “Classic Reissue”, ISBN 0-7803-2
- [7] Πλιάτσικας Γ., «Κεφάλαιο 2: Μαγνητισμός» σελ. 10-31, Πτυχιακή Εργασία *Μικρομαγνητικές προσομοιώσεις σε MATLAB για μαγνητικά υλικά Co-Fe-Ni με επίδραση της θερμοκρασίας*, Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό Ίδρυμα Καβάλας
- [8] L. Néel, Propriétés magnétiques des Ferrites; Férrimagnétisme et antiferromagnetisme, *Annales de Physique* (Paris) **V.3**, page 137-198 (1948)
- [9] Herrera S.M., Bachsmidt A., Villain F., Bleuzen A., Marvand V., Wernsdorfer W., Verdaguer M., (13 January 2008) «Mixed valency and magnetism in cyanometallates and Prussian blue Analogues» Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **366**(1862): page 127-138
- [10] <http://www.nitt.edu/home/acadimics/departments/physics/faculty/lectures/justin/students/magnetic/exchange>
- [11] Feynman, Richard P., Robert B., Leighton, Mathew Sands (1963). *The Feynman Lectures on Physics*, **Vol.I**, USA: California Institute of Technology, page 37.5-37.6
- [12] Τέγγερης Χρ., «Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή» σελ. 1-11, Διπλωματική Εργασία *Αλληλεπιδράσεις μεταξύ μαγνητικών σκίρμιον*, Πανεπιστήμιο Κύπρου, Κύπρος 2015
- [13] O’ Handley R.C., *Modern Magnetic Materials Principles and Applications*, Wiley Interscience: New York, 1999
- [14] Shonski R., J. Pgys.: *Condens. Matter*. **15**, R841 (2003)

- [15] Σαμοθρακίτης Στ., «Κεφάλαιο 2: Μαγνητικές ιδιότητες σωματιδίων στη μικρο και νανο κλίμακα» σελ. 26, Μεταπτυχιακή Εργασία Προσομοιώσεις & σχεδιασμός μαγνητικού συστήματος για τη μαγνητική οδήγηση νανοσωματιδίων, ΕΜΠ, Αθήνα 2014
- [16] Bozorth R.M. Ferromagnetism, *Academic Press* 1998
- [17] <http://www.southampton.ac.uk/~rph/thesis/mode/8.tml>
- [18] Meiklejohn W.H. Exchange Anisotropy--- A Review. *Journal of Applied Physics* **33**(3), p. 1328-1335, (1962)
- [19] Meiklejohn W.H., Bean C.P. New Magnetic Anisotropy, *Physical Review* **105**(3), p. 904-913, (1957)
- [20] Moran T.J, Gallego J.M., Ivan K.S. Increased exchange anisotropy due to disorder at permalloy/CoO interfaces. *Journal of Applied Physics* **78**(3), p. 1887-1891, (1995)
- [21] Yelon A. *Physic of thin film*, M.H. Francombe
- [22] Luborsky F.S. *Electro-Technology*, p.107, (1962)
- [23] Ohkoshi M., Tamari K., Harada M., Honda S., Kusuda T. Microstructure and Exchange Anisotropy of Co-CoO sputtered films with Perpendicular Magnetization, *Magnetics in Japan*, *IEEE Translation Journal on* **V.1**(1), p.37-38, (1985)
- [24] Ching T. Magnetics of small magnetoresistive sensors (Invited). *Journal of Applied Physics* **55**(6), p.2226-2231, (1984)
- [25] Dieny B., Speriosu V.S., Metin S., Parkin S.S.P, Gurney B.A., Baumgart P., Wilhoit D.R. Magnetotransport properties of magnetically soft spin-valvestructures (intived). *Journal of Applied Physics* **69**(8), p.4774-4779, (1991)
- [26] Skupryev V., Stoyanov S., Zhang Y., Hadjipanayis G., Givord P., Nogues J. Beating the superparamagnetic limit with exchange bias. *Nature* **423**(6942), p.850-853, (2003)
- [27] Nogues J., Lederman D., Moran T.J., Schuller I.K. Positive Exchange Bias in FeF₂-Fe Bilayers. *Physical Review Letters* **76**(24), p.4624-4627, (1996)
- [28] Leighton C., Nogues J., Jonsson –Akerman B.J., Schuller I.K. Coercivity Enhancement in Exchange Biased Systems Driven by Interfacial Magnetic Frustration. *Physical Review Letters* **84**(15), p.3466-3469, (2000)
- [29] Makhlof S.A. Magnetic properties of Co₃O₄ nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **246**(1-2), p.184-190, (2002)
- [30] Bram van Dijk, “Chapter 1: Introducing Magnetic Skyrmions” p.10-18, Master Thesis *Skyrmions and Dzyaloshinskii-Moriya Interaction*, Utrecht University, December 2014

- [31] IE Dzyaloshinskii. On the magneto-electrical effect in antiferromagnets, (1960)
- [32] Tôru Moriya. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Physical Review* **V.120**(1), p.91, (1960)
- [33] Fert A., Cros V. and Sampaio J. “Skyrmion on the track”. *Nature Nanotechnology* **V.8**(3). pp. 152-156, (2013)
- [34] Keffer F. “Moriya interaction and the problem of the spin arrangements in β -mns”. *Physical Review* **V.126**(3), p.896, (1962)
- [35] De Jongh L. and Block R. “on the exchange interactions on some 3D-metal ionic compounds: I. the 180° superexchange in the 3-D metal fluorides xmf_3 and x_2mf_4 ($\text{x}=\text{K}, \text{Rb}, \text{Tl}$; $\text{m}=\text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}$)”. *Physica B+ C* **V.79**(6). pp.568-593, (1975)

Τοπολογικές δομές στον μαγνητισμό

Η σύζευξη σπιν-τροχιάς (spin-orbit coupling, SOC) περιγράφει τη σχετιστική αλληλεπίδραση μεταξύ των σπιν και της ορμής των βαθμών ελευθερίας των ηλεκτρονίων και είναι κεντρικής σημασίας για τα φαινόμενα που παρατηρούνται σε συστήματα συμπτυκνωμένης ύλης. Τα τελευταία χρόνια, έχουν προκύψει νέες φάσεις της ύλης από την αλληλεπίδραση μεταξύ SOC και χαμηλής διαστατικότητας, όπως chiral υφές σπιν, καταστάσεις επιφάνειας και διεπιφάνειας πολωμένου σπιν. Αυτές οι υλοποιήσεις που βασίζονται σε SOC με χαμηλές διαστάσεις είναι συνήθως εύρωστες και μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε θερμοκρασία δωματίου.

2.1 Φαινόμενα που σχετίζονται με τη SOC

Το ηλεκτρικό πεδίο που επιτυγχάνεται από ένα μετακινούμενο ηλεκτρόνιο μεταφράζεται ως ένα μαγνητικό πεδίο αναλογικό προς την ταχύτητα, ένα σχετιστικό αποτέλεσμα το οποίο είναι αξιοσημείωτο στα κρυσταλλικά πλέγματα με βαριά άτομα. Η αλληλεπίδραση Zeeman μεταξύ των σπιν των ηλεκτρονίων και αυτού του αποτελεσματικού μαγνητικού πεδίου είναι ισοδύναμο με τη σύζευξη μεταξύ των σπιν των ηλεκτρονίων και της ορμής των βαθμών ελευθερίας γνωστής ως SOC. Η SOC μπορεί να χωρίσει εκφυλισμένες ζώνες με πεπερασμένη στροφορμή (p , d και f) της ηλεκτρονιακής δομής ζώνης. Το σημαντικό είναι ότι οι επιδράσεις SOC ενισχύονται σε μεγάλο βαθμό στις χαμηλές διαστάσεις. Πρώτον, η συμμετρία αναστροφής είναι σπασμένη στην επιφάνεια ή στη διεπιφάνεια, και το προκύπτον ηλεκτρικό πεδίο ζευγαρώνει με τα σπιν των περιοδεύοντων ηλεκτρονίων. Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό ως φαινόμενο Rashba¹ και παράγει διασπορά διαχωρισμένων σπιν ακόμα και στις επιφάνειες συμβατικών μετάλλων (όπως Au και Bi). Οι τοπολογικοί μονωτές που ανακαλύφθηκαν πρόσφατα έχουν επιφάνεια με πολωμένα σπιν με επιπλέον τοπολογικές ιδιότητες. Και στις δύο αυτές περιπτώσεις, η ισχυρή δισδιάστατη SOC κλειδώνει τα σπιν και την ορμή των ηλεκτρονίων.

Το κλειδώμα σπιν-ορμής σε δισδιάστατες γεωμετρίες έχει άμεσες συνέπειες για την αλληλεπίδραση μεταξύ του φορτίου και της μεταφοράς σπιν. Ένα ρεύμα φορτίου στο επίπεδο προκαλεί μια εγκάρσια συσσώρευση σπιν (ομοιόμορφη πυκνότητα μη μηδενικής πυκνότητας σπιν). Αυτή η συσσώρευση σπιν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εξαγωγή ενός ρεύματος σπιν σε ένα γειτονικό στρώμα (φαινόμενο Edelstein²). Αντίστροφα, η έγχυση ενός ρεύματος σπιν προκαλεί τη σχετική πόλωση των σπιν και το ρεύμα φορτίου στις δισδιάστατες καταστάσεις. Άλλοι τύποι μετατροπής μεταξύ των ρευμάτων φορτίου και σπιν μπορούν να ληφθούν επίσης από τη SOC σε τρισδιάστατους αγωγούς. Ωστόσο, τα παρατηρούμενα αποτελέσματα στις δύο διαστάσεις έχουν ενισχυθεί σημαντικά. Τέτοια φαινόμενα μετατροπής φορτίου σπιν έχουν άμεσες εφαρμογές σε σπιντρονικές τεχνολογίες, οι οποίες βασίζονται στη δημιουργία και την ανίχνευση ρεύματος σπιν³.

Η αλληλεπίδραση μεταξύ της SOC και του μαγνητισμού έχει αυξανόμενη σημασία. Στα συμβατικά μαγνητικά υλικά η σιδηρομαγνητική τάξη, η οποία προκύπτει από την αλληλεπίδραση ανταλλαγής, ευθυγραμμίζει τα γειτονικά σπιν. Μια γνωστή συνέπεια της SOC είναι η μαγνητοκρυσταλλική ανισοτροπία (η προτιμητέα ευθυγράμμιση των ηλεκτρονιακών ροπών κατά μήκος ορισμένων κρυσταλλογραφικών κατευθύνσεων (εύκολοι

άξονες)), μέσω της σύζευξης των ηλεκτρονίων με το κρυσταλλικό πλέγμα του πεδίου. Σε συστήματα που δεν έχουν συμμετρία αναστροφής, η SOC προκαλεί μια chiral αλληλεπίδραση Dzyaloshinskii-Moriya (DMI)^{4,5}.

Το DMI είναι μια chiral αλληλεπίδραση που μειώνει ή αυξάνει την ενέργεια των σπιν και εξαρτάται από το αν η περιστροφή από $\vec{S}_1$ στο $\vec{S}_2$ γύρω από το $\vec{D}_{12}$ (Σχέση 1.7) είναι δεξιόστροφη ή αριστερόστροφη. Εάν τα $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$ είναι αρχικά παράλληλα, τότε το αποτέλεσμα ενός επαρκούς ισχυρού DMI (σε σχέση με την ανταλλαγή και την ανισοτροπία) είναι η εισαγωγή κλίσης γύρω από το $\vec{D}_{12}$. Το DMI ήταν αρχικά κατανοητό ως αλληλεπίδραση υπερανταλλαγής σε μαγνητικούς μονωτές^{4,5} και αργότερα επεκτάθηκε σε κεντροσυμμετρικά μέταλλα⁶. Σε ένα διαταραγμένο μαγνητικό κράμα, ένα μεγάλο στοιχείο SOC θα μπορούσε να διαμεσολαβήσει σε μια αλληλεπίδραση μεταξύ δύο κοντινών μαγνητικών ατόμων, με αποτέλεσμα το διάνυσμα Dzyaloshinskii-Moriya να είναι κάθετο στο σχηματιζόμενο επίπεδο από τα τρία άτομα. Βασικά αυτό το μοντέλο επεκτάθηκε σε πολυστρωματικές μαγνητικές δομές, όπου η συμμετρία αναστροφής σπάει από την παρουσία μιας διεπιφάνειας⁷. Η ύπαρξη διαπαφής DMI καταδείχτηκε πρώτα από την παρατήρηση των σπειροειδών χωρικών διαμορφώσεων των σπιν σε μια περιοδικότητα περιέλιξης που σχετίζεται με το μέγεθος του DMI⁸. Το DMI επιτρέπει επίσης των σχηματισμών άλλων chiral δομών σπιν, ειδικότερα chiral μαγνητικά τοιχώματα και σκυρμionia. Αυτό είναι ενδεχομένως σχετικό με τις συσκευές αποθήκευσης πληροφοριών.

2.1.1 Καταστάσεις επιφάνειας και διεπιφάνειας πολωμένου σπιν

Το φαινόμενο Rashba προκύπτει από την SOC και την σπασμένη συμμετρία αναστροφής, στις επιφάνειες των υλικών και στις διεπαφές¹, με την αντίστοιχη Χαμιλτονιανή

$$H_R = v_o \hat{z} \cdot (\vec{k} \times \vec{\sigma}) \quad (2.1)$$

όπου v_o είναι η παράμετρος Rashba, $\vec{\sigma}$ είναι το σπιν, $\vec{k}$ η ορμή και $\hat{z}$ η κανονική μονάδα της επιφάνειας ή της διεπιφάνειας. Το φαινόμενο Rashba έχει ως αποτέλεσμα την διασπορά των σπιν σε διςδιάστατες επιφάνειες και κυρίως το κλείδωμα των σπιν και την ορμή των βαθμών ελευθερίας μεταξύ τους (Σχήμα 2.1).

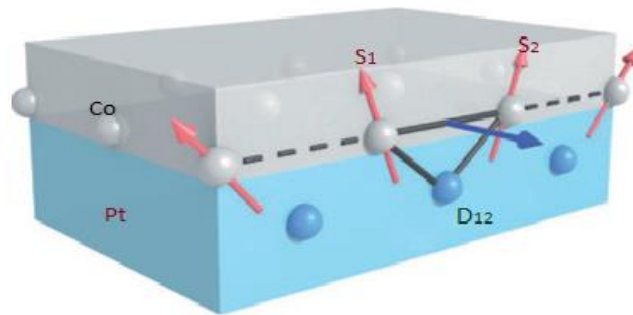


Σχήμα 2.1 Δομή ζώνης και μετατροπή του φορτίου σπιν σε πολωμένο σπιν. Τα βέλη υποδηλώνουν τα σπιν των ηλεκτρονίων με μπλε και κόκκινες επιφάνειες διασποράς που αντιστοιχούν σε αντίθετα ελικοειδή σπιν.

Οι καταστάσεις διασποράς SOC έχουν διερευνηθεί σε διάφορες επιφάνειες και διεπιφάνειες⁹. Οι διεπιφάνειες των βαρέων στοιχείων με μεσαίου βάρους μέταλλα μπορεί να ενισχύει την κλίση δυναμικού εντός επιπέδου μέσω υβριδισμού.

2.1.2 Διεπιφανειακές αλληλεπιδράσεις σπιν και chiral μαγνητισμός

Τα μαγνητικά υλικά που δεν διαθέτουν συμμετρία αναστροφής μπορούν να φιλοξενήσουν το DMI παρουσία ισχυρού SOC. Κατά συνέπεια τα γειτονικά σπιν με κλίση σε σχέση το ένα με το άλλο, οδηγούν σε χωρικές διαμορφώσεις του προσανατολισμού των σπιν. Εάν το μέγεθος του $\vec{D}_{12}$ είναι αρκετά μεγάλο, τότε ο ανταγωνισμός μεταξύ της περιέλιξης DMI και της εναρμόνισης των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής μπορεί να οδηγήσει σε μη-συγγραμμικές καταστάσεις κόκκου (non-collinear ground states)¹⁰. Τέτοιες chiral δομές σπιν ήταν αρχικά αναγνωρισμένες σε μη-κεντροσυμμετρικούς μονοκρυστάλλους¹¹. Ωστόσο, από την αύξηση του επιστημονικού ενδιαφέροντος, είναι η εκδήλωσή τους σε φιλμ και πολυστρωματικές διεπιφάνειες DMI.



Σχήμα 2.2 Διεπαφή DMI και chiral υφή σπιν. Η γκρι επιφάνεια είναι Co και η γαλάζια επιφάνεια Pt. Τα κόκκινα βέλη υποδηλώνουν τα σπιν $\vec{S}_1$ (προς τα αριστερά) και $\vec{S}_2$ (προς τα δεξιά) ενώ το μπλε βέλος υποδηλώνει το διάνυσμα $\vec{D}_{12}$.

Οι διεπιφάνειες μεταξύ υπερεύσθητων μαγνητικών υλικών και μετάλλων με ισχυρή SOC μπορεί να φιλοξενήσει DMI, λόγω της σπασμένης συμμετρίας αναστροφής¹². Οι μεγάλες διεπαφές DMI (πραγματικό μέγεθος $\vec{D}_{12}$ συγκρίσιμο με την σταθερά ανταλλαγής J_{ij}) και οι επακόλουθες υφές σπιν παρατηρήθηκαν για πρώτη φορά σε σπειροειδή σπιν Mn επί W(110) και σκυρμionία σε Fe και Fe/Pd στο Ir(111)¹³. Παρουσία της σταθεράς ανισοτροπίας (K), αυτό οδηγεί σε συγγραμμικές μαγνητικές περιοχές, διαχωρισμένες από chiral τοιχώματα τύπου Néel, δηλαδή εκείνα με chiral περιστροφή σπιν μέσω του μαγνητικού τοιχώματος που καθορίζεται από τον προσανατολισμό του.

Το σχήμα 2.2 δείχνει μια τέτοια διεπαφή μεταξύ μιας μαγνητικής μεμβράνης (Co) και ενός μετάλλου με ισχυρή SOC (Pt). Ab-initio μελέτες έχουν δώσει πληροφορίες σχετικά με το μηχανισμό διεπαφών DMI σε διάφορα υλικά¹³. Για παράδειγμα, έχει αποδειχθεί ότι σε μια διεπαφή Co/Pt το DMI είναι ισχυρότερο από το στρώμα Co που είναι κοντά στη διεπαφή και σχετικά αμελητέα σε άλλες στρώσεις Co.

2.2 Τοπολογία στη φυσική

Τοπολογία είναι ο κλάδος των μαθηματικών που μελετά ιδιότητες του χώρου οι οποίες διατηρούνται κάτω από συνεχείς μετασχηματισμούς. Λόγω του γεγονότος ότι η τοπολογία δεν αλλάζει κάτω από συνεχείς μετασχηματισμούς, η τοπολογική περιγραφή φυσικών συστημάτων γίνεται πολύ κρίσιμη όταν τα συστήματα περιέχουν δομές που είναι δυνατόν να παραμορφωθούν. Τέτοια συστήματα συναντιούνται σε πολλούς τομείς της φυσικής. Μερικά παραδείγματα είναι: διάφορες ενεργειακές ζώνες ηλεκτρονίων, το συμπύκνωμα Bose-Einstein, οι αντισιδηρομαγνητικοί υπεραγωγοί, όπως επίσης και οι μαγνητικές δομές εντός μαγνητικών υλικών. Επίσης, κάποια φαινόμενα τα οποία

δημιουργούνται λόγω της τοπολογίας του συστήματος είναι το κβαντικό φαινόμενο Hall, οι τοπολογικοί μονωτές και διάφορα αναδυόμενα ηλεκτρομαγνητικά πεδία. Στην τοπολογία δύο δομές είναι ισοδύναμες όταν δύναται να μεταβούμε από τη μια δομή στην άλλη μέσω ενός συνεχούς μετασχηματισμού. Στη φυσική η τοπολογία ενός συστήματος καθορίζει τους δυνατούς και απαγορευμένους μετασχηματισμούς που μπορούν να γίνουν στο σύστημα. Αυτοί με τη σειρά τους καθορίζονται από τους φυσικούς περιορισμούς που υπάρχουν εντός του συστήματος. Μερικά παραδείγματα τέτοιων περιορισμών μπορεί να είναι ενεργειακά φράγματα και απαγορευμένες καταστάσεις του συστήματος.

Για να μπορεί να γίνει τοπολογική περιγραφή ενός φυσικού συστήματος θα πρέπει πρώτα η τοπολογική ταξινόμηση που θα γίνει στο φυσικό σύστημα να βασίζεται σε κάποια απ' τα φυσικά του χαρακτηριστικά. Για παράδειγμα στα μαγνητικά συστήματα ισχύουν τα εξής: Πρώτον, στα περισσότερα μαγνητικά συστήματα ο μαγνητισμός εντός των υλικών μεταβάλλεται σε κλίμακες απόστασης πολύ μεγαλύτερης της πλεγματικής σταθεράς λόγω της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής, που ευνοεί τα γειτονικά σπιν του υλικού να προσανατολίζονται παράλληλα το ένα στο άλλο. Ως εκ τούτου, το σχετικό διανυσματικό πεδίο του μαγνητισμού περιγράφεται αρκετά καλά από ένα μοντέλο συνεχούς πεδίου, κάτι που αποτελεί προϋπόθεση για τη χρήση τοπολογίας. Δεύτερον, η αλληλεπίδραση ανταλλαγής, η οποία κλιμακώνεται με την κλίση του μαγνητισμού, θέτει ένα ενεργειακό φράγμα για ασυνεχείς παραμορφώσεις, πέρα από τις οποίες η τοπολογία του συστήματος μεταβάλλεται. Και τρίτον, η μαγνητοστατική αλληλεπίδραση και η μαγνητική ανισοτροπία σταθεροποιούν τα σύνορα της δομής (που βρίσκονται στις άκρες του υλικού). Ως εκ τούτου, επιτρέπονται συνεχείς μετασχηματισμοί μεταξύ ισοδύναμων τοπολογιών, υπό την προϋπόθεση ότι αυτά δεν τροποποιούν το σύνορο της δομής.

2.3 Τοπολογική ταξινόμηση των μαγνητικών διαμορφώσεων

Παραδοσιακά, ο μαγνητισμός στη νανοκλίμακα έχει επικεντρωθεί κυρίως στη μελέτη ομοιόμορφων μαγνητικών νανοσωματιδίων ή λεπτών μεμβρανών. Ωστόσο, τώρα υπάρχει αυξανόμενη ικανότητα προετοιμασίας και χωρισμού μη-ομοιόμορφων διαμορφώσεων στη νανοκλίμακα με την μορφή μαγνητικών τοιχωμάτων, δινών ή ακόμα και σκυρμιονίων, τα οποία αποτελούν μελλοντικές συσκευές μνήμης¹⁴. Όλες αυτές οι διαμορφώσεις είναι γνωστές ως τοπολογικές ατέλειες (topological defects) καθώς η σταθερότητά τους μπορεί να ανιχνευθεί σε τοπολογικές μελέτες.

Οι τοπολογικές μελέτες χρησιμεύουν σημαντικά στην εξήγηση της εξαιρετικής σταθερότητας αυτών των μαγνητικών διαμορφώσεων. Παρόμοιες θεωρίες χρησιμοποιούνται για τον εντοπισμό σταθερών διαμορφώσεων στη θεωρία του κβαντικού πεδίου¹⁵, κυρίως στον τομέα Higgs. Παρόμοιες μέθοδοι έχουν επίσης προταθεί για τις ατέλειες σε συστήματα συμπτυκνωμένης ύλης, στους υγρούς κρυστάλλους και στα υπερρευστά. Ο μαγνητισμός είναι ίσως το πιο αρχέτυπο παράδειγμα ως παράμετρος τάξης, καθώς η ίδια η μαγνήτιση, μπορεί να υπόκειται σε διάφορες κρυσταλλικές ανισοτροπίες οι οποίες μπορεί να έχουν μονοαξονική ή επίπεδη συμμετρία, δισδιάστατη ή τρισδιάστατη διάταξη.

Πριν συζητήσουμε λεπτομερώς αυτές τις ατέλειες, είναι βολικό να εισάγουμε κάποιες βασικές τοπολογικές ιδέες. Δύο διαμορφώσεις μαγνήτισης θεωρούνται ότι είναι τοπολογικά ισοδύναμες αν είναι δυνατόν να παραμορφωθούν συνεχώς μεταξύ τους χωρίς να πρέπει να ξεπεράσουμε ένα άπειρο φράγμα ενέργειας. Αντίθετα οι διαμορφώσεις λέγεται ότι δεν είναι ισοδύναμες όταν δεν είναι δυνατή μια τέτοια διαμόρφωση¹⁵. Οι κλάσεις ισοδύναμων διαμορφώσεων σχηματίζουν κλάσεις ισοδυναμίας που αποκαλούνται μερικές φορές “τοπολογικοί τομείς”.

Στα πραγματικά μαγνητικά συστήματα, οι ενεργειακοί φραγμοί δεν είναι ποτέ απεριόριστοι για διάφορους λόγους. Πρώτον, οι μικροσκοπικές διαμορφώσεις σπιν καθορίζονται σε ένα διακριτικό πλέγμα, έτσι ώστε, η συνεχής περιγραφή που χρησιμοποιείται για τοπολογικές εκτιμήσεις να είναι μόνο μια προσέγγιση. Δεύτερον, το πειραματικό σύστημα είναι απαραίτητως πεπερασμένο και οι τοπολογικές ατέλειες μπορούν απλώς να εξωθούνται από το δείγμα (π.χ. ένα μαγνητικό τοίχωμα μπορεί να ωθηθεί έξω από έναν νανοσωλήνα). Τρίτον, οι ανισοτροπίες είναι πάντα πεπερασμένες, ο περιορισμός της μαγνήτισης σε μια συγκεκριμένη υποπεριοχή, όπως το εύκολο επίπεδο ή ο εύκολος άξονας να είναι απλά μια προσέγγιση. Αυτό έχει ως συνέπεια ότι υπό ορισμένες περιστάσεις θα θεωρούνταν μια τοπολογική ατέλεια που μπορεί να παραμορφωθεί ή ακόμα και να εξαφανιστεί σε μια πραγματική κατάσταση. Παρ' όλα αυτά, η ταξινόμηση των ατελειών μέσω των τοπολογικών αντιλήψεων είναι μια ισχυρή έννοια για να εξηγήσει τη σταθερότητα ορισμένων διαμορφώσεων.

Τέλος, αυτό που χρειαζόμαστε στη συνέχεια είναι απλά το γεγονός ότι μπορούμε να βρούμε μια τοπική ενέργεια ελαχιστοποιώντας την ενέργεια (ή την δράση) εντός ενός δεδομένου τοπολογικού τομέα. Παραδείγματα τέτοιων διαμορφώσεων στον μαγνητισμό είναι τα μαγνητικά τοιχώματα ή σολιτόνια, οι δίνες και τα σκυρμιόνια.

2.3.1 Αριθμός περιέλιξης (winding number)

Δεδομένου ότι οι τοπολογικές ατέλειες στα μαγνητικά πεδία χαρακτηρίζονται από ομότοπες τάξεις, είναι χρήσιμος ο προσδιορισμός ενός “δακτυλικού αποτύπωματος” το οποίο προσδιορίζει τις διαμορφώσεις που ανήκουν σε μια απ' τις ομοτοπικές τάξεις. Ένα τέτοιο αποτύπωμα προέρχεται από τον βαθμό της χαρτογράφησης $f: M \rightarrow N$, όπου M και N είναι (προσανατολισμένες, συμπαγείς) πολλαπλοί. Ο αριθμός περιέλιξης ή βαθμός χαρτογράφησης $\deg f$, μετράει πόσες φορές το M είναι τυλιγμένο γύρω από το N κάτω από το χάρτη f . Για ένα ορισμένο σημείο $P \in N$ αυτός ο αριθμός επιτυγχάνεται με του υπολογισμό του αριθμού των “προ-εικόνων” $X_k \in M$ οι οποίοι χαρτογραφούνται όλοι στο ίδιο σημείο $P \in N$ δηλαδή $P = f(X_k)$. Ο βαθμός χαρτογράφησης λαμβάνεται καθώς ο αριθμός των προ-εικόνων X_k σταθμίζεται από τον προσανατολισμό του χάρτη f . Αυτός ο σταθμισμένος αριθμός των προ-εικόνων δίνεται από:

$$\deg f = \sum_{X_k \in f^{-1}(P)} \text{sgn} D(X_k) \quad (2.2)$$

όπου $D = \det(\partial f^i / \partial x^j)$ είναι το Ιακωβιανό της χαρτογράφησης και το sgn υποδηλώνει την τιμή του. Για γενικούς λόγους (θεώρημα Brouwer), αυτό αποδεικνύει ότι ο βαθμός χαρτογράφησης δεν εξαρτάται από την επιλογή του P . Επίσης, ο βαθμός χαρτογράφησης είναι ακέραιος αριθμός και δεν αλλάζει με συνεχείς παραμορφώσεις του χάρτη f . Ο βαθμός χαρτογράφησης που εξαρτάται από την εξίσωση (2.2) είναι πράγματι το απολύτως επιθυμητό δακτυλικό αποτύπωμα των ομότοπων τάξεων. Είναι ένας ακέραιος από την κατασκευή και είναι αμετάβλητος από κάθε ομάδα ομοτόπων.

Ας θεωρήσουμε ότι $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Αυτό, αν και εμμέσως, περιλαμβάνει επίσης την περίπτωση των αντιστοιχιών μεταξύ n -σφαιρών λόγω του γεγονότος ότι για διαμορφώσεις μαγνήτισης που προσεγγίζουν μια σταθερή τιμή στο άπειρο $\vec{m}_\infty$, η εν λόγω συμπαγής $\mathbb{R}^n \cup \{\infty\}$ μπορεί να χαρτογραφηθεί πάνω στο S^n , π.χ. μέσω στερεογραφικής προβολής σε σχέση με το βόρειο πόλο, που στέλνει το άπειρο στον βόρειο πόλο του S^n . Στη συνέχεια

μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις γνωστές σχέσεις για τη συνάρτηση δ και να εκφράσουμε τον βαθμό χαρτογράφησης ως $\deg f = \int_M d^n x D(x) \delta(f(x) - P)$. Εναλλακτικά χρησιμοποιώντας μια αυθαίρετη (μη κανονικοποιημένη) συνάρτηση μέσου όρου μ στο N , ο βαθμός χαρτογράφησης μπορεί να εκφραστεί ως $\deg f = \int_M d^n x D(x) \mu(f(x)) / \int_N d^n y \mu(y)$. Αυτή η σχέση είναι πιο χρήσιμη όταν εκφράζεται ως μορφή ελεύθερης συντεταγμένης που ισχύει για χαρτογράφηση μεταξύ δύο αυθαίρετων n -διαστάσεων M και N :

$$\deg f = \frac{\int_M f^* \Omega}{\int_N \Omega} \quad (2.3)$$

όπου Ω είναι μια διαφορική μορφή του n που ορίζεται στις N και $f^* \Omega$ και δηλώνει την ανάκαμψή του στο M . Τώρα ενδιαφερόμαστε για την περίπτωση του $N = S^n$, και το Ω επιλέγεται κατάλληλα ως επιφάνεια όγκου σε σχέση με τη μετρική που προκαλείται από $\mathbb{R}^{n+1}$, δηλαδή $\Omega = *rdr$. Σημειώνουμε ότι αυτό σημαίνει ό,τι $d\Omega = (n+1)\omega$, με ω να είναι μια τυπική μορφή του όγκου από το $\mathbb{R}^{n+1}$.

Το πρώτο θεώρημα του Hopf, το οποίο δηλώνουμε χωρίς απόδειξη συνοψίζει τον σημαντικό ρόλο του βαθμού χαρτογράφησης της ταξινόμησης των αντιστοιχιών μεταξύ δύο n -σφαιρών: (i) δύο ομαλών λειτουργιών $f, g: S^n \rightarrow S^n$ με $n \geq 1$, είναι ομοτοπικά ισοδύναμες, $f \sim g$, iff $\deg f = \deg g$, (ii) $f \sim 0$ iff $\deg f = 0$ και (iii) $\deg f$ παρέχει ένα βίτρισμα μεταξύ των ομότοπων τάξεων του $f: S^n \rightarrow S^n$ και του ακέραιου $\mathbb{Z}$.

Τέλος, επιστρέφουμε στον ρητό υπολογισμό του αριθμού περιέλιξης για μερικές σημαντικές καταστάσεις. Η πιο προφανής περίπτωση είναι ο χαρακτηρισμός των διαμορφώσεων τύπου Vortex σε δύο διαστάσεις. Κατά μήκος ενός βρόχου, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.3, η περιστροφή του απλού επιπέδου κυμαίνεται ως $\vec{m}(\tau) = (\cos\phi(\tau), \sin\phi(\tau))$, όπου $0 \leq \tau \leq \pi$ παραμετροποιεί τον βρόχο και στη συνέχεια απαιτεί $\vec{m}(0) = \vec{m}(2\pi)$. Μπορούμε στη συνέχεια να αντικαταστήσουμε το $d\vec{f}$ με $(\partial_\tau m^i)$ και ο βαθμός περιέλιξης ή τύλιξης μπορεί να εκφραστεί ως:

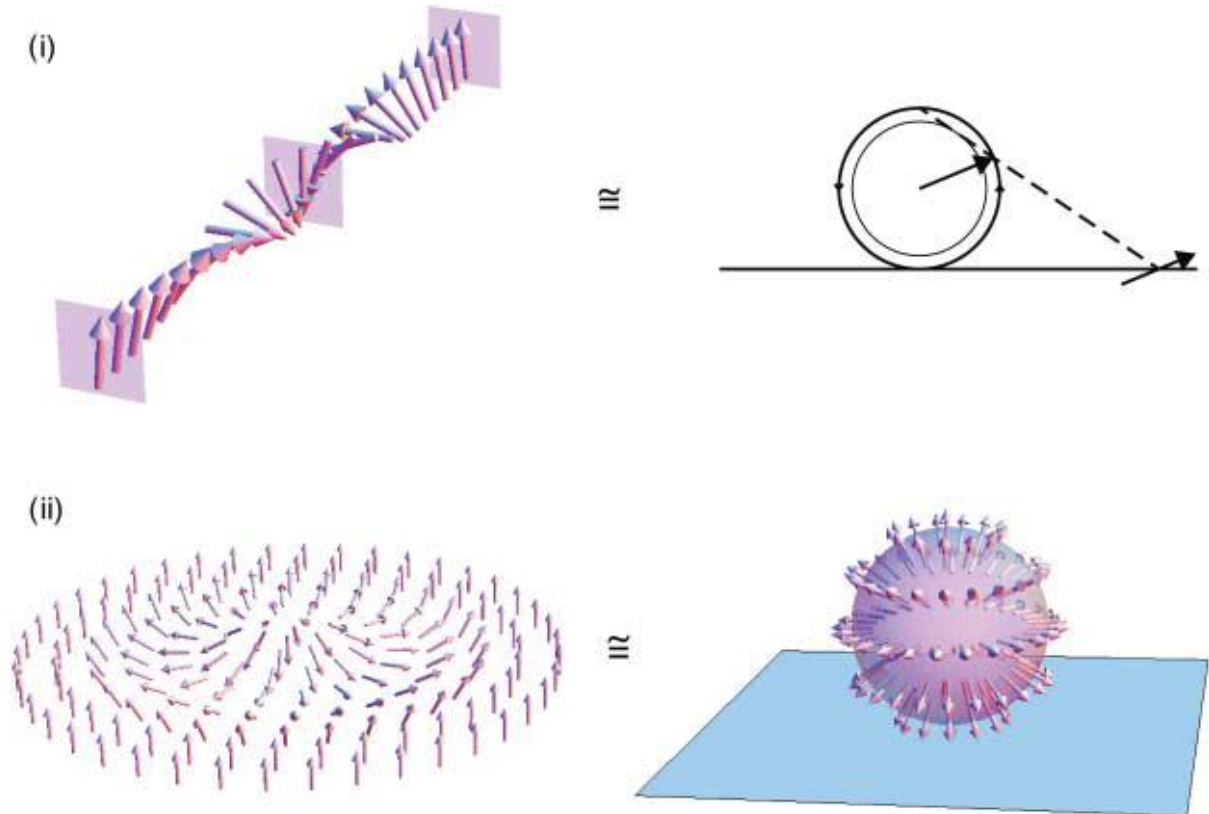
$$w = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\tau \partial_\tau \phi \quad (2.4)$$

Αυτό το αποτέλεσμα μας επιτρέπει να αξιολογήσουμε τον αριθμό περιέλιξης της διαμόρφωσης που παρουσιάζεται στο σχήμα 2.3. Συγκεκριμένα βλέπουμε ότι η απλή στρόβιλος του σχήματος 2.3 περιγράφεται από τη σχέση: $\phi = \tau + \pi/2$ και ως εκ τούτου $w = 1$. Είναι επίσης εύχρηστο να γράψουμε έναν εκπρόσωπο των διαμορφώσεων με έναν αριθμό περιέλιξης n , δηλαδή $\phi(\tau) = n\tau$.



Σχήμα 2.3 Χαρτογράφηση διαμόρφωσης με $w=1$.

Η δεύτερη σημαντική εφαρμογή της σχέσης 2.3 αφορά τα μοναχικά αντικείμενα, όπως τα σολιτόνια ή τα σκυρμιόνια που εμφανίζουν ένα μαγνητικό πεδίο $\vec{m}(\vec{r})$ που είναι ομαλό και μη μοναδικό παντού. Τέτοιες διαμορφώσεις χαρακτηρίζονται από το γεγονός ότι ο μαγνητισμός τείνει ασυμπτωτικά σε μια σταθερά, δηλαδή $\vec{m}(|\vec{r}| \rightarrow \infty) = \vec{m}_\infty$. Ο πραγματικός χώρος $\mathbb{R}^n \cup \{\infty\}$ μπορεί στη συνέχεια να συμπίπτει σε S^n μέσω στερεογραφικής προβολής, όπως σκιαγραφείται στο σχήμα 2.4. Συγκεκριμένα, τώρα μας ενδιαφέρει η περίπτωση των $n=1$ και $n=2$, δηλαδή τις περιστροφές του εύκολου επιπέδου σε μια αλυσίδα και τις ισοτροπικές περιστροφές σε ένα επίπεδο.



Σχήμα 2.4 Παραδείγματα διαμορφώσεων με $\vec{m}(|r| \rightarrow \infty) = \vec{m}_\infty = \text{const.}$ (i) Μαγνητικά τοιχώματα ή σολιτόνια σε ένα σύστημα εύκολου επιπέδου. (ii) Σκυρμιόνια σε ένα δισδιάστατο σύστημα.

Οι περιστροφές με εύκολο επίπεδο σε μια αλυσίδα μπορούν να παραμετροποιηθούν όπως και στην προηγούμενη περίπτωση στη μορφή $\vec{m}(x) = (\cos\phi(x), \sin\phi(x))$ με $-\infty < x < \infty$ που ορίζει την χαρτογράφηση f στην περίπτωση αυτή. Στη συνέχεια μπορούμε να προχωρήσουμε, όπως παραπάνω για να λάβουμε τον αριθμό περιέλιξης των σολιτονίων:

$$w = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \partial_x \phi \quad (2.5)$$

η οποία μετράει τον αριθμό των περιστροφών του μαγνητικού πεδίου με εύκολο επίπεδο καθώς περνά η αλυσίδα. Ο μαγνητισμός τείνει σε μια σταθερή τιμή $\vec{m}_\infty$ για $x \rightarrow \pm\infty$.

Για σφαιρικές περιστροφές σε δύο χωρικές διαστάσεις, θεωρούμε την παραμετροποίηση $\vec{m}(x,y) = (m^1, m^2, m^3)$ με $\sum_i (m^i)^2 = 1$ που ορίζει το f . Απ' την παρακάτω σχέση μπορούμε να υπολογίσουμε τον αριθμό περιέλιξης των σκυρμιονίων:

$$w = \frac{1}{4\pi} \iint dx dy \vec{m} \cdot (\partial_x \vec{m} \times \partial_y \vec{m}) \quad (2.6)$$

για ένα μαγνητικό πεδίο με $\vec{m}(|\vec{r}| \rightarrow \infty) = \vec{m}_\infty$.

Αυτά τα αποτελέσματα καταδεικνύουν ότι είναι δυνατόν να εκχωρήσουμε ένα ακέραιο σε κάθε τοπολογική ατέλεια, τον βαθμό χαρτογράφησης ή τον αριθμό περιέλιξης. Αυτό ισχύει για τις αντιστοιχίες που παίρνουν n-στροφές σε μια n-οστή σφαίρα. Ισχύει για ατέλειες με παραμετρική διάταξη όπως είναι οι δίνες, τα σολιτόνια και τα σκυρμιόνια. Στην πρώτη περίπτωση τα αποτελέσματα μας οδηγούν σε συγκεκριμένες συνδέσεις μεταξύ των διαστάσεων των τοπολογικών ατελειών και των διαστάσεων της παραμέτρου διάταξης και τον υποκείμενο φυσικό χώρο. Σημειώνουμε επίσης ότι το θεώρημα Hopf υποδηλώνει ότι δύο ατέλειες με διαφορετικούς αριθμούς περιέλιξης δεν μπορούν να παραμορφώνονται συνεχώς μεταξύ τους. Μια δεύτερη σημαντική συνέπεια είναι ότι ο συνδυασμός δύο ατελειών θα οδηγήσει σε μια νέα ατέλεια της οποίας ο βαθμός χαρτογράφησης είναι το άθροισμα των βαθμών χαρτογράφησης των μεμονωμένων ατελειών. Αυτό είναι ένα παράδειγμα του τοπολογικού νόμου διατήρησης.

2.3.2 Παραδείγματα τοπολογικών ατελειών

Υπάρχει μια κατηγορία τοπολογικών ατελειών που εμφανίζονται όταν η μαγνήτιση τείνει ασυμπτωτικά να είναι ομοιόμορφη με τιμή $\vec{m}_\infty = \text{constant}$ ως $|\vec{r}| \rightarrow \infty$. Ο άμεσος χώρος $\mathbb{R}^d$ μπορεί τότε να προβάλλεται στερεογραφικά στη διατρητή σφαίρα d διαστάσεων με το σημείο που αντιστοιχεί στο $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ (λεγόμενη συμπύκνωση ενός σημείου). Εάν ο χώρος διαμόρφωσης της παραμέτρου διάταξης είναι μια m-σφαίρα, S^m , τότε μπορεί να προκύψουν τοπολογικές ατέλειες όταν $d=m$, λόγω της σχέσης $\pi_n(S^n) \cong \mathbb{Z}$. Εδώ μας ενδιαφέρουν οι διαστάσεις $d \leq 2$. Σε αντίθετη θέση με άλλες διαμορφώσεις, όπως μαγνητικά τοιχώματα ή δίνες, οι υπάρχουσες διαμορφώσεις δεν περιέχουν ένα μοναδικό σημείο, όπου η παράμετρος τάξης $\vec{m}$ εξαφανίζεται.

Ένα απλό παράδειγμα προκύπτει όταν $m=d=1$, δηλαδή, όταν ασχολούμαστε με διευθετήσεις σπιν με εύκολο επίπεδο κατά μήκος μιας αλυσίδας. Αυτή είναι η κατάσταση που περιγράφεται από ένα μονοδιάστατο μοντέλο, το μοντέλο sine-Gordon¹⁶, το οποίο περιγράφεται από μια μεταβλητή πεδίου $\phi(x,t)$. Λόγω της σχέσης $\pi_n(S^n) \cong \mathbb{Z}$, δηλαδή, $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$, τοπολογικά διακριτές διαμορφώσεις πεδίου (για περιοδικές οριακές συνθήκες ή ϕ σταθερό στο άπειρο) χαρακτηρίζονται στη συνέχεια από πόσες φορές περιτυλίγονται γύρω από ένα εύκολο επίπεδο S^1 καθώς προχωράμε κατά μήκος του δείγματος και ο αριθμός περιέλιξης $w = \int dx \partial_x \phi$ που δίνεται από την εξίσωση (2.5) μετρά πόσες φορές (συμπεριλαμβανομένου του σημείου) το πεδίο περιτυλίγει το μοναδιαίο κύκλο καθώς διασχίζουμε το δείγμα. Η περιτύλιξη περίπου μια φορά αντιστοιχεί σε ένα τοπολογικό σολιτόνιο σε καλόπιστο μοντέλο sine-Gordon¹⁶, με τον χαρακτηριστικό αριθμό περιέλιξης w ή την συνολική χειρικότητα (chirality). Για παράδειγμα, ένα μοναδικό σολιτόνιο στο μοντέλο sine-Gordon χαρακτηρίζεται από $w=\pm 1$, όπως απεικονίζεται στο σχήμα 2.4(i), ενώ ζεύγη σολιτονίων μπορεί να αντιστοιχούν σε συνολικό αριθμό περιέλιξης $w=2$ όταν τα δυο σολιτόνια έχουν την ίδια χειρικότητα, το λεγόμενο ζεύγος σολιτόνιο-σολιτόνιο. Αντίθετα δύο σολιτόνια αντίθετης χειρικότητας έχουν αριθμό περιέλιξης $w=0$ και μπορούν να παραμορφώνονται συνεχώς στην ομοιόμορφη κατάσταση “κενού”. Ωστόσο, για μαγνητικά συστήματα με ανισοτροπία εύκολου άξονα, ο παραπάνω αριθμός περιέλιξης είναι ελαφρώς διαφορετικός από τη χειρικότητα του σολιτονίου που ορίζεται παρακάτω.

Στη μαγνητική περίπτωση, το επίπεδο του σολιτονίου, δεν τυλίγεται μια φορά από τον μοναδιαίο κύκλο αλλά μάλλον συνδέει ελάχιστα δύο ανισοτροπίες που διαφέρουν από μια γωνία π . Μια πλήρης συστροφή γύρω από το μοναδιαίο ($w=\pm 1$) επιτυγχάνεται με ένα ζεύγος

μαγνητικών τοιχωμάτων ή σολιτονίων με την ίδια χειρικότητα. Αυτή η χειρικότητα θα ορίζεται ως $C_x = (1/\pi) \int_{-\infty}^{\infty} dx \partial_x \phi$, όπου ϕ η αζιμουθιακή γωνία (azimuthal angle) στο εύκολο επίπεδο. Η χειρικότητα C_x μπορεί επομένως να θεωρηθεί ως το “ήμισυ” του αριθμού περιέλιξης w . Ως εκ τούτου οι διαμορφώσεις των ζευγών των σολιτονίων που έχουν την ίδια χειρικότητα έχουν αριθμό περιέλιξης $w=1$ και είναι τοπολογικώς σταθερά σε σχέση με το εύκολο επίπεδο. Τέτοιες διαμορφώσεις ορίζονται επομένως ως ζεύγη σολιτόνιο-σολιτόνιο. Αντίθετα δύο σολιτόνια αντίθετης χειρικότητας έχουν αριθμό περιέλιξης $w=0$ και ως εκ τούτου είναι ομοτοπικά ισοδύναμα με την σιδηρομαγνητική κατάσταση και ονομάζονται ζεύγη σολιτόνιο-αντισολιτόνιο.

Η δεύτερη ενδιαφέρουσα περίπτωση που σχετίζεται με το μαγνητισμό προκύπτει για διαστάσεις $d=m=2$, δηλαδή, για ισοτροπικά σπιν σε ένα δισδιάστατο επίπεδο. Στην συνέχεια η εξίσωση $\pi_n(S^n) \cong \mathbb{Z}$ προβλέπει την $\pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$, και έτσι υπάρχουν τοπολογικές μη τετριμμένες διαμορφώσεις. Αυτές οι ατέλειες ονομάζονται σκυρμιόνια (skyrmions) και οφείλουν το όνομά τους στον Skyrme που διερεύνησε τοπολογικές ατέλειες στη θεωρία του μέσου πεδίου¹⁷. Στο πλαίσιο του μαγνητισμού, αυτές οι ατέλειες απέκτησαν δημοτικότητα χάρη στην έρευνα του Belavin και Polyakov που κατασκεύασαν λύσεις για τέτοιες ατέλειες για ισοτροπικούς μαγνήτες ή μη-γραμμικά μοντέλα sigma¹⁸. Ένα τέτοιο παράδειγμα μιας τέτοιας διαμόρφωσης φαίνεται στο σχήμα 2.4(ii). Τέτοιες ατέλειες έχουν αποκτήσει πρόσφατα προβολή ως τρισδιάστατες εκδοχές, των ατελειών γραμμής των σκυρμιονίων που παρατηρήθηκαν πρόσφατα¹⁹ στο MnSi.

2.4 Μαγνητικά σκυρμιόνια

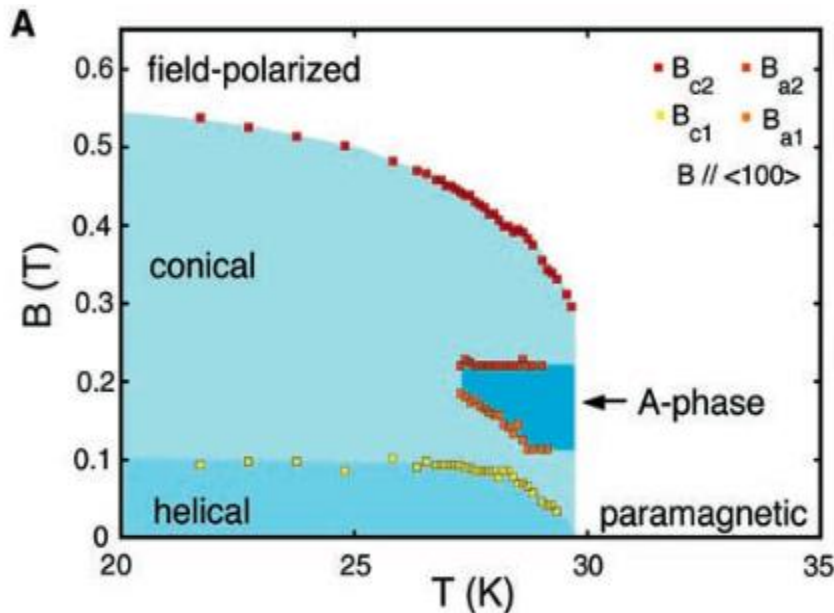
Τα μαγνητικά σκυρμιόνια είναι τοπολογικά σταθερές δομές σπιν, οι οποίες συνήθως οφείλουν την ύπαρξή τους στην αλληλεπίδραση Dzyaloshinskii-Moriya η οποία παρατηρείται σε χειραλικούς μαγνήτες και είναι στην ουσία ένα είδος μαγνητικού τοιχώματος. Είναι μαγνητικά τοιχώματα κυλινδρικού σχήματος αποτελούμενες από δύο περιοχές χωρισμένες μεταξύ τους. Οι δύο αυτές περιοχές είναι μια μικρή περιοχή στο κέντρο του σκυρμιονίου και οτιδήποτε εκτός από αυτήν. Οι δύο αυτές περιοχές έχουν ομοιόμορφο μαγνητισμό, αλλά με αντίθετες κατευθύνσεις.

Η ιδέα των μαγνητικών σκυρμιονίων προτάθηκε αρχικά το 1961 από τον Skyrme^{20,21}. Σύμφωνα με τον Skyrme, τα σωματίδια είναι τοπολογικά προστατευμένα, υπό την έννοια ότι χαρακτηρίζονται από έναν τοπολογικό ακέραιο που δεν μπορεί να μεταβληθεί από μια συνεχή παραμόρφωση της διαμόρφωσης του πεδίου. Αυτό το μοντέλο (στο οποίο τα σωματίδια ονομάζονται σκυρμιόνια) έχει προταθεί για να εξηγήσει τα αδρόνια στην πυρηνική φυσική. Ωστόσο, είναι ενδιαφέρον, ότι έχει αποδειχθεί ότι είναι σχετικά σε συστήματα συμπυκνωμένης ύλης, όπως το κβαντικό σύστημα Hall²², οι υγροί κρύσταλλοι και το συμπύκνωμα Bose. Πράγματι προβλέφθηκε ότι τα τοπολογικά προστατευμένα σωματίδια μπορούν να σταθεροποιηθούν σε χειραλικούς μαγνήτες²³, με τη μορφή σταθερών δομών σπιν που αναφέρονται ως μαγνητικά σκυρμιόνια.

2.4.1 Πρώτη παρατήρηση

Οι δομές των σπιν των σκυρμιονίων οι οποίες μελετήθηκαν για πρώτη φορά το 2009, χρησιμοποιώντας σκέδαση νετρονίων^{19,24}. Αυτό ονομάστηκε αρχικά φάση-A και μετά φάση σκυρμιονίου²⁵, η οποία εντοπίστηκε σε έναν chiral μαγνήτη. Η φάση-A εμφανίζεται στο σχήμα 2.5 ανάμεσα σε άλλες chiral φάσεις. Στο πρώτο πείραμα χρησιμοποιήθηκε σκέδαση νετρονίων για να παρατηρηθεί ο αυθόρμητος σχηματισμός σκυρμιονίων σε ένα δισδιάστατο

πλέγμα MnSi. Επίσης, έχουν γίνει παρατηρήσεις σε πραγματικό χώρο, χρησιμοποιώντας τεχνικές μικροσκοπίας. Τα σκυρμιόνια έχουν παρατηρηθεί επίσης και σε πολλά άλλα υλικά, όπως τα ημιαγώγιμα υλικά ενίσχυσης $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, σε σίδηρο και κοβάλτιο ενισχυμένα με MnSi, σε χειραλικούς Bulk μαγνήτες και σε λεπτά υμένα. Ωστόσο, για να εξηγηθούν οι λειτουργίες των σκυρμιονίων, θα επικεντρωθούμε στο MnSi.



Σχήμα 2.5 Το σχήμα δείχνει τις διαφορετικές μαγνητικές φάσεις του MnSi. Το διάγραμμα περιλαμβάνει τη φάση-A η οποία μετονομάστηκε σε φάση σκυρμιονίου.

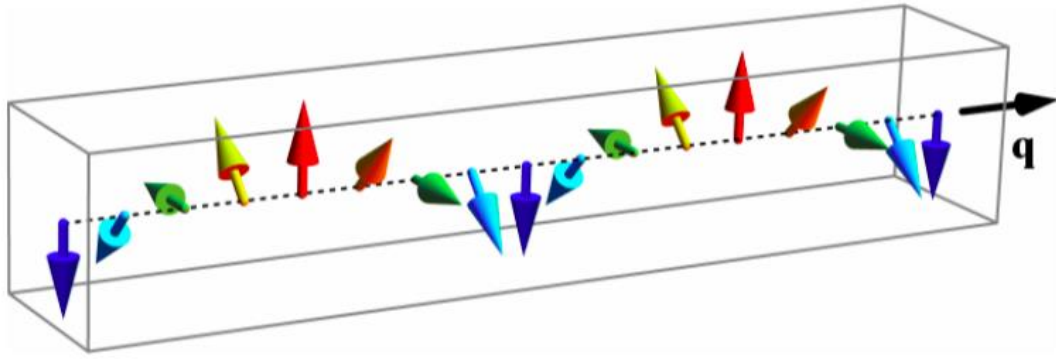
Η πρώτη παρατήρηση μαγνητικών σκυρμιονίων έγινε σε χειραλικό σιδηρομαγνήτη MnSi. Επιπλέον, το MnSi κρυσταλλώνει σε B20 που στερείται συμμετρία αναστροφής. Αυτή η ιδιότητα επιτρέπει να εμφανιστεί μια μη-ανάστροφη συμμετρία μαγνητικής δομής. Τα σκυρμιόνια είναι μια τέτοια δομή.

Στο διάγραμμα φάσης ενός σιδηρομαγνήτη, υπάρχουν δύο φάσεις. Τα σπιν διατάσσονται κάτω από τη θερμοκρασία Curie και πάνω από αυτό το σημείο τα σπιν έχουν αλλάξει κατεύθυνση και έχουν γίνει διαταραγμένα. Περιμένουμε να δούμε τις ίδιες φάσεις και στο διάγραμμα MnSi, δεδομένου ότι είναι ένας σιδηρομαγνήτης.

Εμείς βλέπουμε διαφορετικές φάσεις, όταν κοιτάζουμε το διάγραμμα φάσης (Σχήμα 2.5). Οι πιο εξοικειωμένες φάσεις είναι: η πολωμένη φάση, η οποία παρουσιάζεται για μεγάλα μαγνητικά πεδία και η παραμαγνητική φάση, η οποία εμφανίζεται πάνω από τη θερμοκρασία Curie.

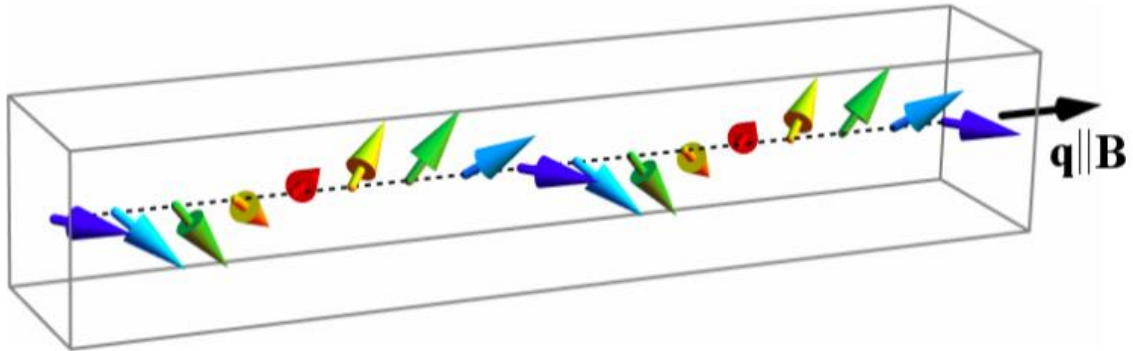
Μεταξύ αυτών των δύο φάσεων, υπάρχουν τρεις επιπλέον φάσεις που δεν είναι παρόντες σε έναν σιδηρομαγνήτη. Οι φάσεις αυτές ονομάζονται chiral φάσεις. Οι φάσεις αυτές οφείλονται στις αλληλεπιδράσεις DMI. Υπάρχει μια ελικοειδή φάση, μια κωνική φάση και μια φάση-A. Υπάρχει μια έντονη ενέργεια ανταλλαγής σε αυτόν τον μαγνήτη, που ευνοεί την ομοιόμορφη μαγνήτιση. Η ασθενέστερη κλίμακα ενέργειας προέρχεται από την αλληλεπίδραση DMI. Αυτή η αλληλεπίδραση ευθύνεται για τις συνεστραμμένες δομές σπιν, όπως οι τρεις chiral φάσεις (Σχήμα 2.5). Υπάρχουν και άλλες αλληλεπιδράσεις που λαμβάνουν χώρα αλλά είναι αμελητέες.

Η ελικοειδής φάση εμφανίζεται κάτω από τη θερμοκρασία Curie σε μικρό (ή μηδενικό) μαγνητικό πεδίο. Η μαγνήτιση στην ελικοειδή φάση προεξέχει γύρω από τον άξονα ο οποίος είναι κάθετος προς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Η ελικοειδής μαγνήτιση φαίνεται στο σχήμα 2.6. Εάν η θερμοκρασία είναι κάτω από τη θερμοκρασία Curie και το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο αυξάνεται, συμβαίνει μια διασταύρωση στην κωνική φάση.



Σχήμα 2.6 Η ελικοειδής φάση, όπου οι διεργασίες μαγνήτισης λαμβάνουν χώρα γύρω από το διάνυσμα διάδοσης.

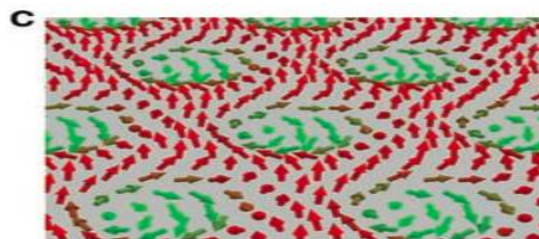
Η διασταύρωση μεταξύ της ελικοειδούς φάσης και της κωνικής φάσης παρουσιάζεται στο $B_{c1} > 0.1T$, όταν $T < T_c$. Στην κωνική φάση η μαγνήτιση αποκτά μια μέγιστη συνιστώσα παράλληλη με το μαγνητικό πεδίο. Η γωνία του κώνου συνεχώς μειώνεται στο μηδέν όταν το μαγνητικό πεδίο αυξάνεται μέχρι να φτάσει την τιμή $B = 0.55T$, σημείο στο οποίο όλα τα σπιν είναι σε στοίχιση. Το προφίλ της μαγνήτισης της κωνικής φάσης φαίνεται στο σχήμα 2.7.



Σχήμα 2.7 Η κωνική φάση, όπου οι διεργασίες μαγνήτισης λαμβάνουν χώρα γύρω από το διάνυσμα διάδοσης, και έχει μια συνιστώσα παράλληλη προς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

Είναι σημαντικό να δούμε ότι για μια τιμή μαγνητικού πεδίου $B > 0.55T$ το φαινόμενο της αλληλεπίδρασης DMI είναι πολύ αδύναμο σε σύγκριση με την ενέργεια ανταλλαγής. Κυριαρχεί η σιδηρομαγνητική ενέργεια και η αλληλεπίδραση DMI είναι αμελητέα. Έτσι για ένα ισχυρό μαγνητικό πεδίο, έχουμε ένα πολωμένο πεδίο ως κατάσταση κόκκου.

Η φάση-A παρουσιάζεται σε μια μικρή περιοχή του διαγράμματος φάσης. Η περιοχή για θερμοκρασίες κάτω από τη θερμοκρασία Curie και για τιμές μαγνητικού πεδίου, γύρω στο $B = 0.02T$. Σε αυτή τη μικρή δισδιάστατη περιοχή το εξαγωνικό πλέγμα του (αντι)-σκυρμιονίου είναι σταθερές καταστάσεις κόκκου του συστήματος. Το μαγνητικό πεδίο είναι κάθετο προς το δικτυωτό πλέγμα του σκυρμιονίου. Όπως απεικονίζεται στο σχήμα 2.8, το δικτυωτό πλέγμα αποτελείται από διάφορες επιμέρους δομές σκυρμιονίων.



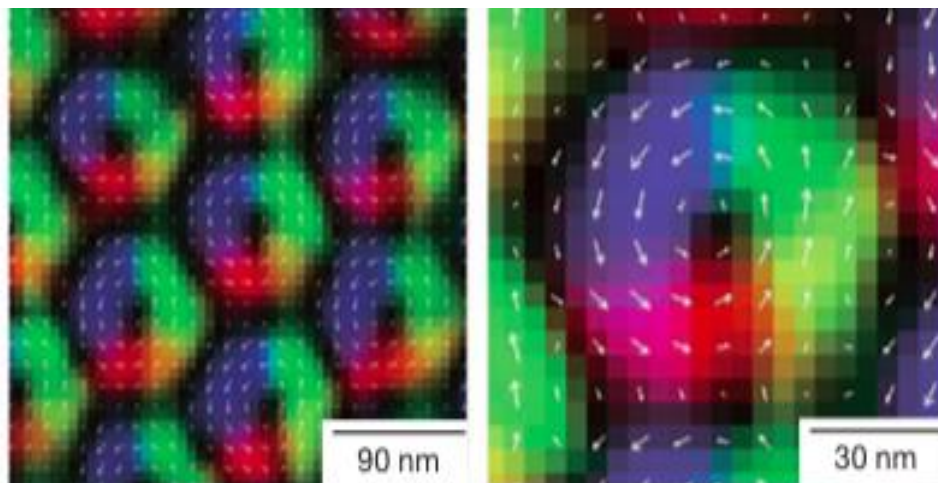
Σχήμα 2.8 Μοντελοποιημένο πλέγμα σκυρμιονίου σε MnSi (φάση-A).

Το ατομικό σκυρμιόνιο που εμφανίζεται στο πλέγμα είναι μια δομή που έχουμε δει στο σχήμα 1.13. Η μαγνητική δομή είναι αμετάβλητη κατά μήκος του μαγνητικού πεδίου, το οποίο είναι κάθετο στη δομή του σκυρμιονίου. Το χρώμα στην εικόνα υποδεικνύει αν τα σπίν είναι παράλληλα (μπλε) ή αντιπαράλληλα (κόκκινο) με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Επίσης, το σκυρμιόνιο είναι περιστρεφώς συμμετρικό εάν περιστρέφεται γύρω από τους άξονες παράλληλα με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Εμείς μπορούμε να φανταστούμε ότι θα μπορούσαν να σχηματιστούν σωλήνες αν μπορούσαμε να περιστρέψουμε τη δομή του σκυρμιονίου κατά μήκος του μαγνητικού πεδίου.

Πριν την ανακάλυψη της δομής του σκυρμιονίου το 2009, η ιδέα ότι η φάση-A ήταν ένα είδος έλικας με ένα κυματοδιάγραμμα, ευθυγραμμισμένο κάθετα προς το εφαρμοσμένο πεδίο. Χρησιμοποιώντας σκέδαση νετρονίων αυτή η υπόθεση διαψεύστηκε, δεδομένου ότι η δομή που εμφανίζεται στη φάση-A είναι ένα εξαγωνικό πλέγμα. Ωστόσο, με την χρήση της σκέδασης νετρονίων, δεν είναι δυνατόν να εξαγάγουμε τη μαγνητική δομή της φάσης-A. Οι μετρήσεις του τοπολογικού φαινομένου Hall της φάσης-A είναι απαραίτητες για να αποδείξουμε ότι η φάση-A αντιστοιχεί σε φάση σκυρμιονίου.

Το τοπολογικό φαινόμενο Hall προκαλείται από το μαγνητικό πεδίο των σκυρμιονίων σε ηλεκτρόνια αγωγιμότητας. Η κίνηση ενός σκυρμιονίου οδηγεί σε μια αλλαγή στο μαγνητικό πεδίο που παράγεται από το σκυρμιόνιο και έτσι αλλάζει η ηλεκτρομαγνητική επαγωγή. Στη συνέχεια, το επαγόμενο ηλεκτρικό πεδίο συνεισφέρει στο φαινόμενο Hall όταν μετακινούνται τα σκυρμιόνια. Από τις μετρήσεις του τοπολογικού φαινομένου Hall η μαγνητική δομή της φάσης-A παρουσιάζεται στο σχήμα 2.8. Αυτή η απεικόνιση της φάσης-A αναφέρεται ως υπόθεση μια εικόνας του πραγματικού χώρου της μαγνήτισης.

Το 2010 οι εικόνες πραγματικού χώρου παρήχθησαν χρησιμοποιώντας τη μικροσκοπία σκέδασης ηλεκτρονίων Lorentz (Lorentz Transmission Electron Microscopy, LTEM). Η εικόνα του πραγματικού χώρου της φάσης-A παρουσιάζεται στο σχήμα 2.9. Δεδομένου ότι στα άκρα και το κέντρο ενός σκυρμιονίου, η μαγνήτιση δεν προσδιορίζεται και είναι μαύρη. Αυτό που βλέπουμε στο σχήμα 2.9 είναι η περιέλιξη της μαγνήτισης γύρω από το κέντρο του σκυρμιονίου. Η υπόθεση επικυρώνεται και από τότε προσδιορίζεται η φάση-A ως δομή του σκυρμιονίου.



Σχήμα 2.9 Απεικόνιση του πραγματικού χώρου της μαγνήτισης ενός σκυρμιονίου με τιμή πεδίου $B=50\text{mT}$ χρησιμοποιώντας LTEM.

2.4.2 Μηχανισμοί δημιουργίας μαγνητικών σκυρμιονίων

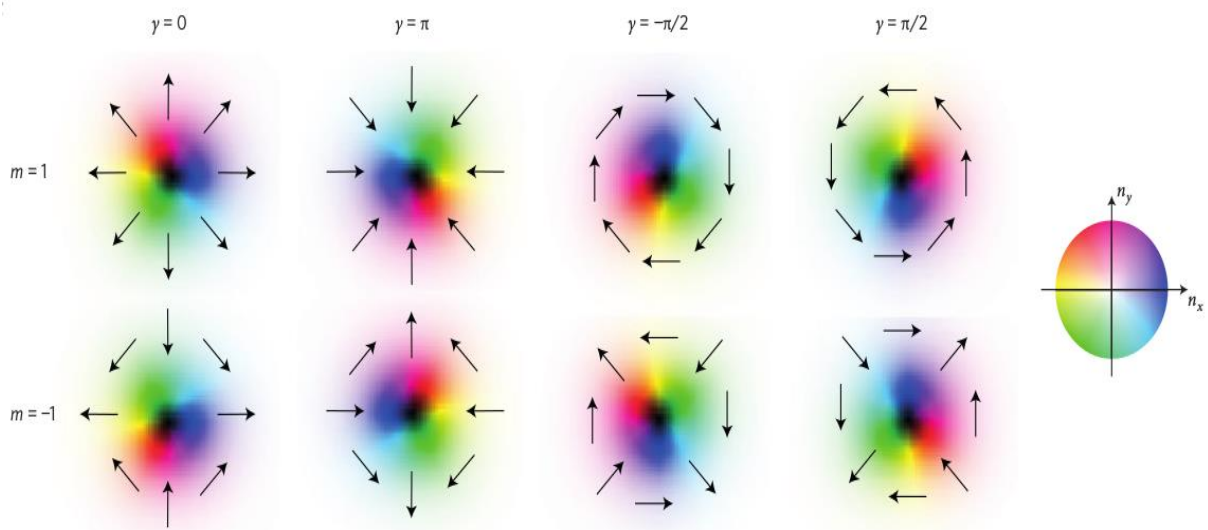
Διάφοροι μηχανισμοί μπορούν να δημιουργήσουν σκυρμιόνια σε μαγνητικά συστήματα και πολλοί μηχανισμοί συμβάλλουν συχνά ταυτόχρονα. Αυτοί οι μηχανισμοί είναι²⁷: (1) Μαγνητικές διπολικές αλληλεπιδράσεις. Εμφανίζεται σε μαγνητικές λεπτές μεμβράνες με κάθετη ανισοτροπία εύκολου άξονα. Η διπολική αλληλεπίδραση ευνοεί το μαγνητισμό στο επίπεδο, ενώ η ανισοτροπία προτιμά τον μαγνητισμό εκτός επιπέδου. Ο ανταγωνισμός μεταξύ αυτών των δύο αλληλεπιδράσεων οδηγεί δε περιοδικές λωρίδες στις οποίες η μαγνήτιση περιστρέφεται στο επίπεδο κάθετο προς το φιλμ. Εφαρμοσμένο μαγνητικό πεδίο κάθετο προς το φιλμ μετατρέπει την κατάσταση της λωρίδας σε μια περιοδική συστοιχία μαγνητικών φυσαλίδων ή σκυρμιονίων. (2) Η σχετική αλληλεπίδραση Dzyaloshinskii-Moriya σε μη-κεντροσυμμετρικούς μαγνήτες, όπως MnSi , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, FeGe και $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$. Σε αυτήν την περίπτωση, συμβαίνει ένας ανάλογος μετασχηματισμός από την ελικοειδή σπείρα στο κρυστάλλινο τριγωνικό πλέγμα, κάτω από το μαγνητικό πεδίο. (3) Σε σύστημα με frustrated exchange interactions, και (4) σε σύστημα με four-spin exchange interaction, οι οποίες μπορούν να οδηγήσουν σε δομές ατομικού μεγέθους. Η περίπτωση (1) μελετήθηκε εκτενώς τη δεκαετία του 1970, με στόχο εφαρμογές μαγνητικών συσκευών μνήμης, ενώ οι περιπτώσεις (2), (3) και (4) αποτελούν το επίκεντρο της εντατικής έρευνας τώρα. Ως εκ τούτου, παρατηρούμε εδώ ορισμένες βασικές μεταξύ αυτών των τεσσάρων περιπτώσεων. Πρώτον, το μέγεθος των σκυρμιονίων είναι διαφορετικό. Στην περίπτωση (1) τα σκυρμιόνια είναι της τάξης των 100nm έως 1μm, η οποία είναι συγκρίσιμη με την περίοδο λ του σπειροειδούς που προσδιορίζεται από την αναλογία των διπολικών αλληλεπιδράσεων και των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής. Στην περίπτωση (2) το μέγεθος καθορίζεται από την αλληλεπίδραση DMI και τυπικά είναι 5-100nm. Στις περιπτώσεις (3) και (4) το λ και το μέγεθος του σκυρμιονίου είναι της τάξεως της πλεγματικής σταθεράς ($\sim 1\text{nm}$). Σαν αποτέλεσμα τα σκυρμιόνια και οι κρύσταλλοι των σκυρμιονίων στις περιπτώσεις (1) και (2) είναι μεγαλύτερο από την πλεγματική σταθερά και η συνεχής προσέγγιση είναι δικαιολογημένη. Σε αυτές τις δύο περιπτώσεις, η πυκνότητα ενέργειας των σκυρμιονίων είναι πολύ μικρή από την ατομική ενέργεια ανταλλαγής J . Με άλλα λόγια, οι συνεχείς συνθέσεις σπιν που ονομάζονται μονώπολες με ενέργεια της τάξης του J μπορούν να δημιουργήσουν ή να εξοντώσουν τα σκυρμιόνια. Αυτά τα μεγάλα σκυρμιόνια έχουν πολλούς εσωτερικούς βαθμούς ελευθερίας και ως εκ τούτου είναι μαλακά και πολύ κινητικά, και απαλλαγμένα από την συναρμολόγηση που αποδίδει το κρυσταλλικό πλέγμα.

2.4.3 Ταξινόμηση των σκυρμιονίων

Η διαμόρφωση του σκυρμιονίου είναι φυσικά σταθερή. Αυτό σημαίνει ό,τι η διαμόρφωση των σπιν ενός σκυρμιονίου θα μπορούσε να ελαχιστοποιήσει την ενέργεια του συστήματος και ως εκ τούτου, το σύστημα ευνοεί αυτή τη διαμόρφωση. Επιπλέον το σκυρμιόνιο προστατεύεται τοπολογικά: μικρές παραμορφώσεις του συστήματος δεν είναι δυνατόν να μετασχηματίσουν τη δομή του σπιν σε κάποια ασήμαντη δομή. Αυτή η τοπολογική ιδιότητα γίνεται ρητή με ένα τοπολογικό φορτίο.

Δύο άλλες παράμετροι οι οποίες συνδέονται με τη διαμόρφωση του σκυρμιονίου είναι τα m και γ . Το m είναι η λεγόμενη στροβιλότητα (vorticity) και δύναται να πάρει ακέραιες τιμές $m=\pm 1$, με $m=1$ να αναφέρεται σε σκυρμιόνια και $m=-1$ να αναφέρεται σε αντισκυρμιόνια (antiskyrmion) και η σταθερά γ είναι η λεγόμενη ελικότητα (helicity) που μετράται σε ακτίνια (rad) και δύναται να πάρει τιμές από 0 έως 2π , αλλά τα σκυρμιόνια παρατηρούνται σταθεροποιημένα μόνο για τιμές 0, $\pm\pi/2$ και π . Ένα σχήμα με το σύνολο των συνδυασμών των τιμών m και γ που μπορούν να συναντηθούν στα σκυρμιόνια που βρίσκονται σε κατάσταση ισορροπίας φαίνεται στο σχήμα 2.10. Ανάλογα με το μηχανισμό

δημιουργίας των σκυρμιονίων, η εξάρτηση της ενέργειας από τα m και γ διαφέρει. Στην περίπτωση (1) η διπολική αλληλεπίδραση οφείλεται στο μαγνητικό φορτίο $\rho_{mag} \propto \nabla \cdot \vec{n}$. Για την καταστολή του ρ_{mag} και του συναφούς ενεργειακού κόστους απαιτούνται $m=1$ και $\gamma=\pm\pi/2$, όταν στο υλικό ευνοείται η δημιουργία μαγνητικών τοιχωμάτων Bloch, είτε $\gamma=0,\pi$ όταν στο υλικό ευνοείται η δημιουργία μαγνητικών τοιχωμάτων τύπου Néel. Ωστόσο η τιμή του $\gamma=\pm\pi/2$ παραμένει απροσδιόριστη, προσδίδοντας στο σκυρμιόνιο επιπλέον βαθμούς ελευθερίας. Στην περίπτωση (2) η ενέργεια για το σχηματισμό σκυρμιονίου είναι χαμηλότερη για $m=1$ και $\gamma=\pm\pi/2$, αλλά η ένδειξη γ καθορίζεται από το πρόσημο της σταθεράς ισχύος της αλληλεπίδρασης DMI όπως αυτή καθορίζεται στη σχέση (1.7), το οποίο με τη σειρά του καθορίζεται από την chiral κρυσταλλική δομή. Στις περιπτώσεις (3) και (4) σε ενέργειες των σκυρμιονίων και αντισκυρμιονίων, δηλαδή των ενεργειών για τιμές $m=\pm 1$ είναι εκφυλισμένες και το γ μπορεί να πάρει αυθαίρετη τιμή από 0 έως 2π .



Σχήμα 2.10 Διάφορες δομές σκυρμιονίων με διαφορετικές τιμές m και γ , όπου τα βέλη απεικονίζουν την κατεύθυνση της συνιστώσας των spin (στο επίπεδο).

2.4.4 Τοπολογικό φορτίο (topological charge)

Το τοπολογικό φορτίο ή ο αριθμός των σκυρμιονίων (skyrmion number), είναι ένας κβαντισμένος αριθμός περιέλιξης που μετράει πόσες φορές η διαμόρφωση περιτυλίγεται γύρω από τη μοναδιαία σφαίρα. Ο αριθμός των σκυρμιονίων έχει οριστεί ως:

$$N_{sk} = \frac{1}{4\pi} \iint d^2\vec{r} \vec{n} \cdot \left(\frac{\partial \vec{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \vec{n}}{\partial y} \right) \quad (2.7)$$

που είναι το ολοκλήρωμα της στερεάς γωνίας (solid angle) και μετρά πόσες φορές το $\vec{n}(\vec{r}) = \vec{n}(x, y)$ περιβάλλει τη μοναδιαία σφαίρα (unit sphere)²⁷. Χρησιμοποιώντας τη συμμετρία του σκυρμιονίου μπορούμε να γράψουμε:

$$\vec{n}(\vec{r}) = (\cos\Phi(\varphi)\sin\theta(r), \sin\Phi(\varphi)\sin\theta(r), \cos\theta(r)) \quad (2.8)$$

όπου εισάγουμε τις πολικές συντεταγμένες $\vec{r} = (r\cos\varphi, r\sin\varphi)$. Βάζοντας αυτή τη μορφή στην εξίσωση (2.7), λαμβάνουμε:

$$N_{sk} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{d\theta(r)}{dr} \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} \sin\theta(r) = [\cos\theta(r)]_{r=0}^{r=\infty} \cdot [\Phi(\varphi)]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}$$

Συνεπώς, μπορεί κάποιος να ταξινομήσει τις δομές των σκυρμιονίων ως εξής: Υποθέτουμε ότι τα σπιν δείχνουν προς τα πάνω στο $r \rightarrow \infty$ ενώ δείχνουν προς τα κάτω στο $r=0$. Τότε, $[\cos\theta(r)]_{r=0}^{r=\infty}=2$. Τώρα, υπάρχουν αρκετές δυνατότητες για $\Phi(\varphi)$. Η στροβιλότητα ορίζεται από τον ακέραιο $m=[\Phi(\varphi)]_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}/2\pi$. Επομένως, η στροβιλότητα καθορίζει τον αριθμό των σκυρμιονίων ως $N_{sk}=m$, αφού καθοριστεί η οριακή συνθήκη στο $r \rightarrow \infty$. Περιορίζουμε περαιτέρω την ελαστικότητα από τη φάση γ που εμφανίζεται στο:

$$\Phi(\varphi) = m\varphi + \gamma \quad (2.9)$$

Στο σχήμα 2.10 παρουσιάζουμε διάφορες δομές σκυρμιονίων που αντιστοιχούν στον στροβιλισμό $m=\pm 1$ και $\gamma=0, \pm\pi/2$ και π . Το σχήμα 1.13 αντιστοιχεί σε $m=1$ και $\gamma=\pi/2$. Από τις εξισώσεις (2.8) και (2.9), το μαγνητικό φορτίο $\rho_{mag} = \nabla \cdot \vec{n}$ υπολογίζεται ως:

$$\rho_{mag} = \cos[(m-1)\varphi + \gamma] \left(\frac{d\theta}{dr} \cos\theta + \frac{m}{r} \sin\theta \right)$$

Από την άλλη πλευρά, η αλληλεπίδραση DMI δίνεται από τη σχέση:

$$\mathcal{H}_{DM} = D\vec{n} \cdot (\nabla \times \vec{n}) = D\sin[(m-1)\varphi + \gamma] \left(\frac{d\theta}{dr} + \frac{m}{2r} \sin\theta \right)$$

ή

$$\mathcal{H}_{DM} = D\vec{n} \cdot (\vec{e}_z \times \nabla)\vec{n} = D\sin[(m-1)\varphi + \gamma] \left(\frac{d\theta}{dr} + \frac{m}{2r} \sin 2\theta \right)$$

Επομένως, η κατάσταση με στροβιλισμό $m=+1$ και $\gamma=\pm\pi/2$ έχει τη χαμηλότερη ενέργεια, όπου η τιμή του γ προσδιορίζεται από την τιμή του D , το οποίο με τη σειρά του καθορίζονται από την κρυσταλλική δομή (όταν το διάνυσμα του DMI περιστρέφεται με $\gamma=0, \pm\pi/2$ ή π γίνεται η σταθερή διαμόρφωση²⁸).

Στην περίπτωση (3) και (4) της δημιουργίας σκυρμιονίων δεν υπάρχει διάκριση μεταξύ του σκυρμιονίου και του αντισκυρμιονίου, δηλαδή $m=\pm 1$ και το γ μπορεί να πάρει αυθαίρετη τιμή.

2.4.5 Εντοπισμένο αντικείμενο

Το σκυρμιόνιο είναι εντοπισμένο αντικείμενο (με την προϋπόθεση ότι αυτό βρίσκεται στο σύστημα στο οποίο είναι ευσταθές). Αυτό σημαίνει πως βρίσκεται περιορισμένο σ' ένα συγκεκριμένο μέγεθος και δεν καταλαμβάνει όλο το χώρο που του δίνεται στο υλικό, εν αντιθέση με τις με τις μαγνητικές δίνες. Το γεγονός αυτό συνεπάγεται ότι μπορούμε να αγνοήσουμε την αλληλεπίδρασή του με τα άκρα του δείγματος όταν το σκυρμιόνιο βρίσκεται αρκετά μακριά από αυτά και να λάβουμε υπόψη μας μόνο αλληλεπιδράσεις με άλλες δομές σπιν, ατέλειες του δείγματος και πολωμένα σπιν ρεύματα (spin polarized currents, SPC). Μια άλλη συνέπεια της ιδιότητας του αυτής είναι ότι μπορούμε να θεωρήσουμε το σκυρμιόνιο σημειακό σωματίδιο και να περιγράψουμε την κίνησή του ως σημειακό σωματίδιο,

αγνοώντας πλήρως την εσωτερική του δομή, θεωρώντας ότι το σωματίδιο βρίσκεται στο κέντρο συμμετρίας του σκυρμιονίου. Για να ισχύει όμως αυτό το μοντέλο για το σκυρμιόνιο θα πρέπει πρώτα να ισχύουν δύο παραδοχές: (i) η δομή του δεν αλληλεπικαλύπτεται με κάποια άλλη δομή σπιν, ή αυτή η αλληλοεπικάλυψη είναι αμελητέα, (ii) όταν κινείται η εσωτερική του δομή δεν παραμορφώνεται και είναι ίδια με τη δομή ενός ακίνητου σκυρμιονίου.

2.4.6 Παρατήρηση των σκυρμιονίων σε μαγνητικά chiral πλέγματα

Μεταξύ των πολλών πιθανών υλικών που φιλοξενούνται από τα σκυρμιόνια είναι κυβικοί αλλά μη κεντροσυμμετρικοί μαγνήτες, όπου μπορούν να εμφανιστούν μη συγγραμικές διαμορφώσεις σπιν (περιλαμβανομένων των δεικτών σπιν (single- $\vec{q}$) και σκυρμιονίων (multiple- $\vec{q}$)). Η αντισυμμετρική αλληλεπίδραση DMI οδηγεί στην διαμόρφωση του ελικοειδούς σπιν, όπως περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή στη συνεχή προσέγγιση²⁹

$$H = \int dr \left[\frac{J}{2} (\nabla \cdot \vec{n})^2 + D \vec{n} \cdot (\nabla \times \vec{n}) - \vec{B} \cdot \vec{n} \right] \quad (2.10)$$

όπου το $\vec{B}$ το μαγνητικό πεδίο. Η κατάσταση κόκκου της Χαμιλτονιανής στην εξίσωση (2.10) είναι μια ελικοειδής κατάσταση με ένα μόνο καματοδιάνυσμα $\vec{Q}$ του οποίου το μέγεθος $Q=2\pi/\lambda$ είναι σταθερό D/J , ενώ η κατεύθυνσή του είναι μεταβλητή. Όταν το D/J είναι μικρό η συνεχής προσέγγιση είναι δικαιολογημένη και το επίπεδο των σπιν είναι κάθετο στο $\vec{Q}$ για να ελαχιστοποιηθεί η ενέργεια στην εξίσωση (2.10). Το Mn με δομή τύπου B20 είναι ένα παράδειγμα αυτού του ελικοειδούς μαγνήτη με $|\vec{Q}|=0.043\text{\AA}^{-1}$ ($\lambda=18\text{nm}$), η οποία δείχνει ένα νέο διάγραμμα φάσης θερμοκρασίας-πίεσης³⁰. Τα πειράματα σκέδασης νετρονίων σε MnSi και $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ αναγνώρισαν τη φάση που μέχρι τώρα ήταν γνωστή ως φάση-A, σε μια δισδιάστατη κρυσταλλική φάση σκυρμιονίου (SkX). Η θεωρητική ανάλυση καταλήγει στο συμπέρασμα ότι το SkX σταθεροποιείται από θερμικές διακυμάνσεις πάνω από την κωνική κατάσταση σε περιορισμένη περιοχή πλησίον της θερμοκρασίας μετάβασης, ενώ η κωνική κατάσταση με το κυματοδιάνυσμα $\vec{Q}$ παράλληλο προς το μαγνητικό πεδίο είναι πιο σταθερή στο υπόλοιπο διάγραμμα φάσης. Αυτός ο τύπος της φάσης SkX μπορεί να θεωρηθεί ως η κατάσταση υβριδοποιημένης τριπλής- $\vec{q}$, στην οποία το $\vec{n}(\vec{r})$ μπορεί να εκφραστεί ως:

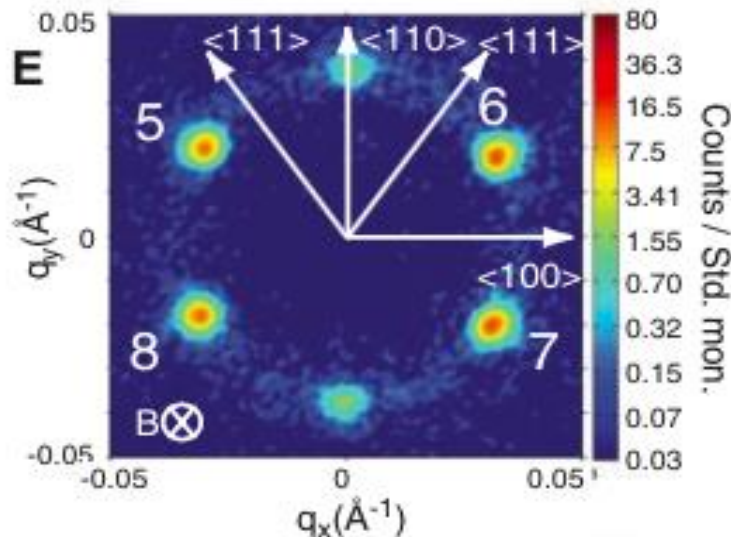
$$\vec{n}(\vec{r}) \approx \vec{n}_{uniform} + \sum_{i=1}^3 \vec{n}_{Q_i}(\vec{r} + \Delta\vec{r}_i)$$

όπου $\vec{n}_{Q_i}(\vec{r})=A[\vec{n}_{i1}\cos(\vec{Q}_i \cdot \vec{r}) + \vec{n}_{i2}\sin(\vec{Q}_i \cdot \vec{r})]$ και $\vec{Q}_i \cdot \Delta\vec{r}_i$ είναι η φάση που δείχνει σύνθετη, A είναι η μαγνήτιση μιας απλής έλικας με το διάνυσμα $\vec{Q}_i$ και $\vec{n}_{uniform}$ είναι η ομοιόμορφη μαγνήτιση που προκαλείται από το φαινόμενο Zeeman. Τα τρία $\vec{q}$ -διανύσματα εφαρμόζονται στην κατεύθυνση του μαγνητικού πεδίου σχηματίζοντας μια γωνία 180° μεταξύ τους ικανοποιώντας τη σχέση:

$$\sum_{i=1}^3 \vec{Q}_i = 0$$

Όταν ένα σκυρμιόνιο είναι ξεχωριστό από αυτήν την εξαγωνική κατάσταση SkX, αντιστοιχεί στην περίπτωση $m=1$, $\gamma=\pi/2$ που φαίνεται στο σχήμα 2.10. Η μαγνητική ελικότητα του σκυρμιονίου εξαρτάται από την τομή της αλληλεπίδρασης DMI, καθώς και από την κατάσταση της ελικότητας.

Το SkX μπορεί να παρατηρηθεί όσον αφορά την μαγνητική κατάσταση νετρονίων (ενδεχομένως και ακτίνων-X). Αντανακλώντας τη μεγάλη κλίμακα μήκους του SkX σε σύγκριση με την απόσταση του πλέγματος, χρησιμοποιείται μικρής γωνίας σκέδαση νετρονίων (SANS)²⁷. Τα πρότυπα SANS αμοιβαίου χώρου για το SkX στο επίπεδο που είναι φυσιολογικό στο προσπίπτον διάνυσμα νετρονίων $\vec{k}$ εμφανίζονται ως ένα εξάγωνο με τον κανόνα του $\vec{Q}$, δηλαδή τον μετασχηματισμό Fourier του δισδιάστατου κωνικού πλέγματος όπως φαίνεται στο σχήμα 2.11, ενώ η κωνική φάση σπιν με το κυματοδιάνυσμα παράλληλο προς το μαγνητικό πεδίο δεν παράγει κανένα σχέδιο σε αυτό το επίπεδο. Μια παρόμοια παρατήρηση του SkX θα είναι δυνατή με χρήση συντονισμού ακτίνων-X με το πλεονέκτημα ότι μπορεί να εφαρμοστεί κρυστάλλους μειωμένου μεγέθους ή λεπτών μεμβρανών.



Σχήμα 2.11 Η φάση SkX (ελήφθη με χρήση σκέδασης νετρονίων).

Για την παρατήρηση του πραγματικού χώρου του SkX μπορούν να χρησιμοποιηθούν τεχνικές μικροσκοπίας ανίχνευσης. Επιπρόσθετα, διάφορες τεχνικές ηλεκτρονικής μικροσκοπίας με πολωμένα σπιν μπορεί να χρησιμοποιηθούν για την παρατήρηση κρυσταλλικών σκυρμιονίων και ενιαίων σκυρμιονίων. Μια σημαντική προϋπόθεση για τέτοιες παρατηρήσεις, είναι ωστόσο, η αναγκαιότητα ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου το οποίο περιορίζει τη χρήση ορισμένων εργαλείων της ηλεκτρονικής μικροσκοπίας. Σε αυτό το πλαίσιο το LTEM είναι μια ισχυρή μέθοδος που έχει νανομετρική χωρική ανάλυση και επιτρέπει την εφαρμογή ενός κατακόρυφου μαγνητικού πεδίου. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να παρατηρήσει τη μαγνήτιση $\vec{M}$ σε επίπεδο ενός δείγματος τύπου πλάκας, πάχους μικρότερου των 100nm, μέσω του οποίου μπορεί να μεταδοθεί η δέσμη ηλεκτρονίων. Το LTEM κάνει χρήση παραγόμενου πεδίου $\vec{B}$ που προκύπτει από το επίπεδο της μαγνήτισης, το οποίο δημιουργεί τη δύναμη Lorentz στα εισερχόμενα ηλεκτρόνια. Τα εκτρεπόμενα ηλεκτρόνια από περιοχές με διαφορετικά επίπεδα μαγνήτισης, δείχνουν τα πρότυπα παρεμβολής σε θέσεις που δεν έχουν επικεντρωθεί και είναι υπερβολικά εστιασμένες. Για παράδειγμα, τα τοιχώματα των μαγνητικών περιοχών εμφανίζονται ως φωτεινές ή σκοτεινές γραμμές στην αποσταθεροποιημένη θέση, ενώ η κατάλληλη κατάσταση κοχλία, παρουσιάζει

μια ριγωτή αντίθεση. Αναλύοντας τα δύο πρότυπα, όσον αφορά τη μέθοδο της εξίσωσης μεταφοράς της έντασης, η τοπική κατανομή μαγνήτισης στο επίπεδο μπορεί να εμφανιστεί με χωρική ανάλυση λόγω νανομέτρων. Το LTEM μπορεί να λειτουργήσει σωστά για την παρατήρηση του πραγματικού χώρου των σκυρμιονίων ή των SkX με μέγεθος μικρότερο από μερικά νανόμετρα, όχι μόνο σε ελικοειδούς μαγνήτες τύπου B20 αλλά και σε πολλούς chiral ή achiral μαγνήτες. Σε ένα δισδιάστατο μοντέλο ελικοειδών μαγνητών, η κρυσταλλική κατάσταση των σκυρμιονίων είναι σταθερή σε ένα ευρύ φάσμα θερμοκρασίας και μαγνητικού πεδίου σε σύγκριση με την κωνική κατάσταση όταν το μαγνητικό πεδίο είναι κάθετο στο επίπεδο. Στο πλαίσιο του σχηματισμού σταθερών σκυρμιονίων σε μια κρυσταλλική λεπτή πλάκα που χρησιμοποιείται στις μετρήσεις LTEM, έχει συζητηθεί θεωρητικά ό,τι η μονοαξονική ανισοτροπία ή οι ανομοιογενείς chiral διακυμάνσεις κατά μήκος του πάχους του στρώματος σταθεροποιούν τη φάση του σκυρμιονίου πάνω από την κωνική κατάσταση.

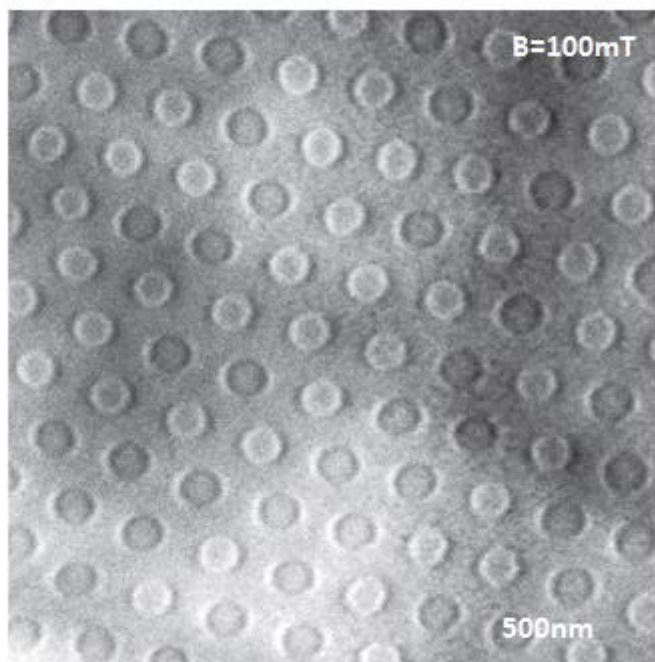
2.4.7 Σκυρμιόνια σε διάφορα μαγνητικά συστήματα

Ελικοειδής μαγνήτες με υψηλή συμμετρία αλλά με chiral κρυσταλλικές δομές, όπως οι κυβικές ενώσεις τύπου B20 είναι πιθανόν να φιλοξενήσουν τη φάση του σκυρμιονίου, είτε παρουσία ενός εφαρμοσμένου μαγνητικού πεδίου είτε όταν το υλικό είναι σε μορφή λεπτού φιλμ. Η ισχύς της αποτελεσματικής προσέγγισης του σπιν Χαμιλτονιανής (εξίσωση (2.10)) σε μαγνήτη chiral πλέγματος έχει αποδειχθεί επίσης για τον μονωτικό μαγνήτη $\text{Cu}_2\text{O-SeO}_3$ με την ίδια ομάδα χώρου ως ενώσεις B20 (αλλά με διαφορετική διάταξη)³¹. Σε αυτό το υλικό η μοναδιαία κυψελίδα αποτελείται από τέσσερις άνισες θέσεις Cu. Τα τρία Cu σπιν ευθυγραμμίζονται περίπου παράλληλα και ένα σπιν αντιπαράλληλα, σχηματίζοντας μια τοπικά σιδηρομαγνητική κατάσταση³². Στην πραγματικότητα, λόγω της αλληλεπίδρασης DMI που προκύπτει από την chiral δομή πλέγματος, ο χονδροειδής τοπικός μαγνητισμός στρίβει σταδιακά για να σχηματίσει μια σταθερή κατάσταση κοχλία με μια τιμή λ των 50nm. Παρά την απουσία των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας ο μονωτικός ελικοειδής μαγνήτης $\text{Cu}_2\text{O-SeO}_3$ παρουσιάζει ένα ανάλογο διάγραμμα μαγνητικής φάσης στο επίπεδο T-B σε εκείνα των μεταλλικών ενώσεων τύπου B20 (για παράδειγμα το Mn). Η φάση SkX επιβεβαιώνεται επίσης ό,τι υπάρχει σε στενή περιοχή T-B κοντά στο όριο φάσης με την παραμαγνητική κατάσταση σε πειράματα SANS, καθώς και μετρήσεις μαγνήτισης³¹. Και πάλι η παρατήρηση LTEM ότι η φάση SkX εξαγωνικού πλέγματος επεκτείνεται σε μια ευρεία περιοχή T-B σε λεπτά δείγματα φιλμ (~50nm).

Ένα σημαντικό σημείο που πρέπει να τονιστεί εδώ είναι ότι το μονωτικό μαγνητικό σπειροειδές πλέγμα είναι πολυσιδηρικό (multiferroic). Στα πολυσιδηρικά τα σιδηροηλεκτρικά και οι μαγνητικές διατάξεις συνυπάρχουν³³. Στα μαγνητικά chiral πλέγματα, ο χημικός δεσμός (π.χ. ο υβριδισμός μεταξύ d-τροχιακών και συνεκτικών p-τροχιακών) ρυθμίζεται από την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς, όταν η ένωση παρουσιάζει σιδηρομαγνητική συμπεριφορά.

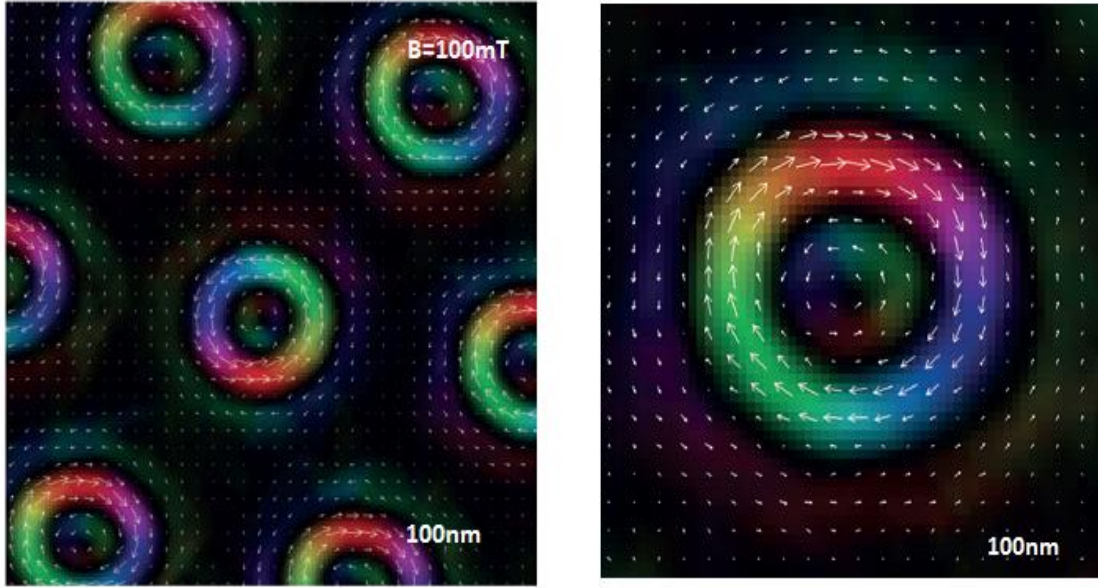
Η εμφάνιση των σπιν περιορίζεται στους ελικοειδής μαγνήτες της αλληλεπίδρασης DMI αλλά επίσης εμφανίζεται σε κεντροσυμμετρικούς μαγνήτες με μορφή λεπτού φιλμ. Σε αυτήν την περίπτωση, η διπολική αλληλεπίδραση παίζει βασικό ρόλο, μαζί με την μονοαξονική μαγνητική ανισοτροπία. Παρόμοια με την περίπτωση των ελικοειδών μαγνητών (helimagnets), η ριγωτή φάση παρατηρείται σε χαμηλά πεδία όταν η μαγνητική ανισοτροπία εκτός επιπέδου υπερβαίνει κάποια κρίσιμη τιμή για την καταστολή του ομοιόμορφου επιπέδου M. Από την άλλη πλευρά, η πλεγματική φάση φυσαλίδων σε ένα τέτοιο ανισότροπο σύστημα, το σύστημα Heisenberg, μπορεί να παρουσιάσει μια πλούσια ποικιλία σχήματος φυσαλίδων, λόγω των ανωτέρων τάξεων της μαγνητικής ανισοτροπίας, καθώς και τον βαθμό ελευθερίας μαγνητικής ελικώσεως.

Παρουσιάζουμε μερικά παραδείγματα των ημιαγωγικών φάσεων (συμπεριλαμβανομένων των σκυρμιονίων) όπως παρατηρήθηκαν από το LTEM για τον κεντροσυμμετρικό μαγνήτη $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x-0.05}\text{Sc}_x\text{Mg}_{0.05})_{12}\text{O}_{19}$ ($x=0.16$) που στο εξής αναφέρεται ως BFSO. Η μαγνητική ένωση $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ (BFO) είναι ένας πολύ γνωστός εξαφαιρίτης (hexaferrite), ο οποίος παράγεται εμπορικά σε μεγάλες ποσότητες, με θερμοκρασία μαγνητικής μετάβασης μεγαλύτερης των 700K και μαγνητικό εύκολο άξονα κατά μήκος του άξονα c. Σε λεπτό ($\sim 50\text{nm}$) c-επίπεδο φιλμ BFSO, στο οποίο η μαγνητική ανισοτροπία ελέγχεται και εξασθενεί ασθενώς με προσθήκη Sc, παρατηρείται έντονα μια ημισφαιρική υφή με συχνές αναστροφές ελικοειδούς μαγνήτισης σε θερμοκρασία δωματίου και μηδενικό μαγνητικό πεδίο. Όταν ένα μαγνητικό πεδίο εφαρμόζεται κανονικά στη μεμβράνη, η φάση SkX αναδύεται (σχήμα 2.12). Κάθε σκυρμιόνιο δείχνει είτε ως μαύρο είτε ως λευκός κυκλικός δίσκος με τυχαίο τρόπο, υποδεικνύοντας ότι τα ελικοειδή σκυρμιόνια (π.χ. δεξιόστροφα ή αριστερόστροφα στο επίπεδο της μαγνήτισης) δεν συσχετίζονται αλλά διαταράσσεται σε αυτό το τριγωνικό πλέγμα SkX. Στην αύξηση της ισχύος του πεδίου, το μέγεθος των σκυρμιονίων τείνει να μειώνεται ενώ η σταθερά πλέγματος SkX αυξάνεται. Αυτό έρχεται σε αντίθεση με την περίπτωση του ανεξάρτητου από μαγνητικό πεδίο σχηματισμό του SkX στον chiral μαγνήτη πλέγματος DMI.



Σχήμα 2.12 Το τριγωνικό πλέγμα σκυρμιονίου σε ένα πεδίο 100mT. Τα φωτεινά και σκούρα χρώματα αντιστοιχούν στις δύο ελικοότητες $\gamma=\pm\pi/2$ (σχήμα 2.10) των σκυρμιονίων, οι οποίες κατανέμονται τυχαία ακόμα και όταν διατάσσονται οι θέσεις των σκυρμιονίων.

Για να εξεταστεί λεπτομερώς κάθε σκυρμιόνιο, εξετάζουμε το σχήμα 2.13. Η κάμψη της μαγνήτισης (ελικοειδής μαγνήτιση) μεταβάλλει την κατεύθυνση δύο φορές από την περιφέρεια προς τις περιοχές του πυρήνα, σχηματίζοντας ένα χαρακτηριστικό τριπλό δακτύλιο. Όταν αντιστοιχίζεται στη μοναδιαία σφαίρα, η τοπική μαγνήτιση εμφανίζει ταλαντώσεις που μοιάζουν με εκκρεμές. Παρ' όλα αυτά, συνολικά η αλλαγή της μαγνήτισης περιτυλίσσεται γύρω από τη συνολική σφαίρα μόνο μια φορά, υποδεικνύοντας το $N_{\text{sk}}=1$. Με τον τρόπο αυτό, ο βαθμός ελευθερίας του ελιγμού που επιτρέπεται στον κεντροσυμμετρικό μαγνήτη μπορεί να εμπλουτίσει σημαντικά χαρακτηριστικά των σκυρμιονίων. Πρέπει να σημειωθεί ότι η εξίσωση της κίνησης για ένα σκυρμιόνιο δεν εξαρτάται από την ελικοότητα αλλά από τον αριθμό των σκυρμιονίων.



Σχήμα 2.13 Εικόνα LTEM του τριγωνικού πλέγματος του σκυρμιονίου με τη δομή του τριπλού δακτυλίου και τυχαίες ελικότητες. Ο χρωματιστός τροχός και τα άσπρα βέλη δείχνουν το μέγεθος και την κατεύθυνση της μαγνήτισης στο επίπεδο.

2.4.8 Τοπολογικά φαινόμενα που σχετίζονται με τα σκυρμιόνια

Η δομή του σκυρμιονίου, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.13, έχει μια μη-ειδική γεωμετρική άποψη, δηλαδή μη-ομοεπίπεδη διάταξη σπιν. Αυτό σημαίνει ότι τα σπιν σχηματίζουν μια σταθερή γωνία, δηλαδή chiral στροφικότητα η οποία περιγράφεται από το πεδίο των μετρήσεων α_μ (εδώ μ είναι ο δείκτης χρόνου-χώρου). Το πεδίο μέτρησης παράγει ηλεκτρομαγνητικό πεδίο που σχετίζεται με τη διαμόρφωση των σπιν και ονομάζεται αναδύομενο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο (emergent electromagnetic field, EEMF). Διάφορα τοπολογικά φαινόμενα προέρχονται από αυτό το πεδίο, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.14. Το EEMF έχει γεωμετρική σημασία στο χώρο των σπιν και παράγει φυσικά αποτελέσματα όταν η δομή των σπιν είναι συζευγμένη έντονα και αναγκασμένη να είναι παράλληλη με τα τοπικά σπιν σε κάθε ατομική θέση, δηλαδή υπακούει τον κανόνα σύζευξης του Hund. Αυτός ο περιορισμός οδηγεί στο α_μ του EEMF που προέρχεται από τη σύζευξη των σπιν των σκυρμιονίων με τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας. Μια αξιοσημείωτη συνέπεια αυτής της σύζευξης είναι η ροπή στρέψης και συνεπώς οι συνδυασμένες εξισώσεις κίνησης για τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας και τα εντοπισμένα σπιν δίνεται³⁴:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_r f - e[(\vec{E} + \vec{e}) + \vec{v} \times (\vec{B} + \vec{b})] \cdot \nabla_k f = -\frac{1}{\tau}(f - f_o) \quad (2.11)$$

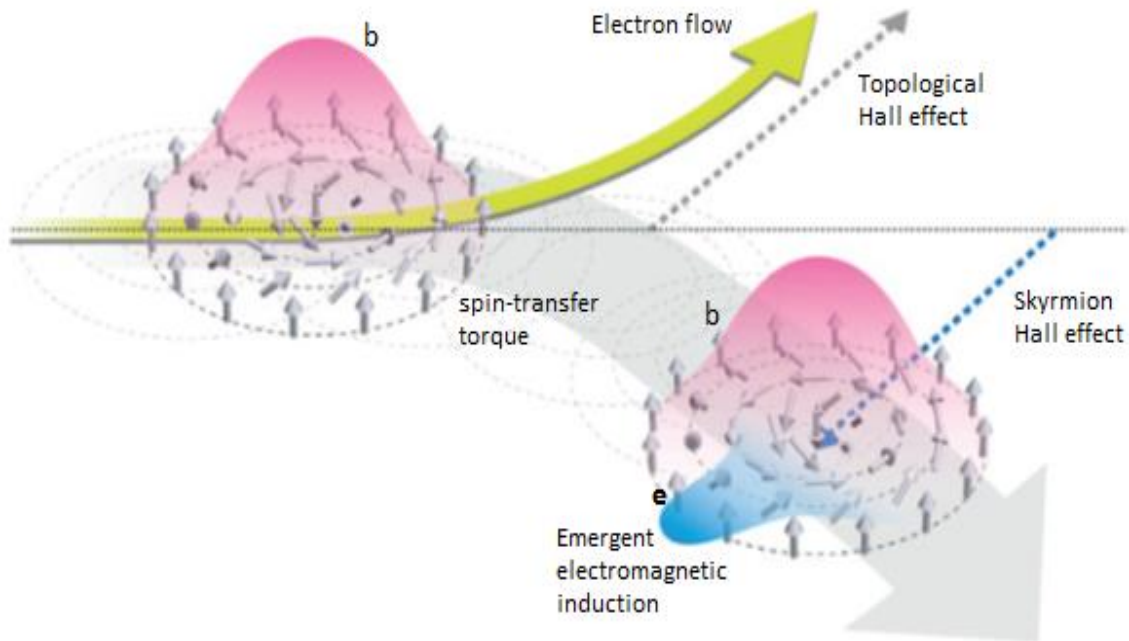
$$\frac{\partial \vec{n}}{\partial t} + (\vec{j} \cdot \nabla) \vec{n} = -\vec{n} \times \frac{\delta H_s}{\delta \vec{n}} + \vec{n} \times \left[a_G \frac{\partial \vec{n}}{\partial t} + \beta (\vec{j} \cdot \nabla) \right] \vec{n} \quad (2.12)$$

όπου η εξίσωση (2.11) είναι η εξίσωση Boltzman για τη συνάρτηση κατανομής ηλεκτρονίων $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ στο χρόνο t , και η εξίσωση (2.12) είναι η εξίσωση Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) για

το σπιν. Στην εξίσωση (2.11) το $\vec{E}(\vec{B})$ είναι το ηλεκτρικό (μαγνητικό) πεδίο και $\vec{e}(\vec{b})$ είναι το αναδύμενο ηλεκτρικό (μαγνητικό) πεδίο, $\vec{k}$ είναι το κυματοδιάνυσμα, $\vec{v}$, τ , $-e$ και f_0 είναι η ταχύτητα, ο μέσος ελεύθερος χρόνος, η συνάρτηση κατανομής φορτίου και η ισορροπία των ηλεκτρονίων αντίστοιχα. Στην εξίσωση (2.12) το $\vec{j}$ είναι η πυκνότητα ρεύματος των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας, το H_s το σπιν Χαμιλτονιανή (spin Hamiltonian), a_G η σταθερά απόσβεσης Gilbert και το β αντιπροσωπεύει το μη-αδιαβατικό αποτέλεσμα. Λόγω της δύναμης Lorentz $-e[(\vec{E} + \vec{e}) + \vec{v} \times (\vec{B} + \vec{b})]$ στην εξίσωση (2.11), συμβαίνει ένα φαινόμενο Hall λόγω του $\vec{b}$ και ονομάζεται τοπολογικό φαινόμενο Hall (topological Hall effect, THE). Στη φάση SkX, η περιοδική συστοιχία της μοναδιαίας ροής ($\phi_0 = h/e$, όπου h η σταθερά Planck) που συνδέεται με κάθε σκυρμιόνιο στο σχεδόν ομοιόμορφο αναδύμενο μαγνητικό πεδίο:

$$\langle b_z \rangle = \frac{\sqrt{3}\phi_0}{2\lambda^2}$$

με $a_s = 2\lambda/\sqrt{3}$ να είναι η πλεγματική σταθερά του τριγωνικού κρυστάλλου του σκυρμιονίου.



Σχήμα 2.14 Σχηματική απεικόνιση της κίνησης των σκυρμιονίων κάτω από τη ροή ηλεκτρονίων. Ένα ρεύμα ηλεκτρονίων οδηγεί τα σκυρμιόνια μέσω ενός μηχανισμού μεταφοράς (spin-transfer torque). Τα ηλεκτρόνια εκτρέπονται από τη δύναμη Lorentz λόγω του αναδύμενου μαγνητικού πεδίου b του σκυρμιονίου, το οποίο έχει ως αποτέλεσμα το THE. Η κίνηση του σκυρμιονίου συνοδεύεται από το χρονικά εξαρτώμενο αναδύμενο μαγνητικό πεδίο (ροζ) και ως εκ τούτου το αναδύμενο ηλεκτρικό πεδίο e , είναι η αναδύμενη ηλεκτρομαγνητική επαγωγή.

Η πρώτη παρατήρηση του επαγόμενου THE από το σκυρμιόνιο σε μια στενή περιοχή T-B ενός μαζικού κρυστάλλου MnSi, αναφέρεται στην τοπολογική αντίσταση Hall ρ_H γύρω στα $5n\Omega\text{cm}$. Για το Mn³⁵ $\lambda=18\text{nm}$, $\langle b_z \rangle=11\text{T}$. Στην πραγματικότητα το πεπερασμένο σπιν (p) μπορεί να οδηγήσει σε μείωση του μεγέθους ρ_H και με την παραδοχή ότι $p \sim 0.22$ η παρατηρούμενη τιμή είναι συνεπής και με την παραπάνω χονδρική εκτίμηση με βάση την

κανονική τιμή του συντελεστή Hall και την πυκνότητα του σκυρμιονίου³⁵. Ακόμα και πριν από μια τέτοια ταύτιση του επαγόμενου από τα σκυρμιόνια THE, μια μεγάλη πρόσθετη απόκριση Hall αναφέρεται για ένα μαζικό κρυσταλλικό MnSi σε μια ευρύτερη περιοχή T-B αλλά υπό υψηλές πιέσεις²⁶. Αυτό μπορεί να ερμηνευτεί με όρους των χαρακτηριστικών της νέας μορφής SkX.

Η περιοχή της φάσης SkX γίνεται πιο σταθερή σε λεπτά φιλμ. Για να διερευνηθεί αυτό, οι μετρήσεις έγιναν σε λεπτά φιλμ FeGe και MnSi. Η περιοχή της φάσης SkX στο επίπεδο T-B ταυτοποιείται από το μέγεθος της απόκρισης του THE.

Ως ένα ακόμα παράδειγμα του THE στη φάση SkX, παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα της αντίστασης Hall για ένα κυβικό πολυκρυστάλλο MnSi τύπου B20, το οποίο έχει ένα σύντομο ελικοειδές κύμα λ που κυμαίνεται από 3nm έως 6nm εξαρτώμενη από τη θερμοκρασία. Η μεταβλητή του λ που εξαρτάται από τη θερμοκρασία δείχνει ότι πρέπει να υπάρχει ένας άλλος σημαντικός παράγοντας, ο οποίος είναι πιθανός να είναι η μαγνητική ανισοτροπία, εκτός από τον ανταγωνισμό μεταξύ των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής και DMI. Αντικατοπτρίζοντας αυτή τη φύση, το χαρακτηριστικό SkX φαίνεται να είναι ποιοτικά διαφορετικό από το συμβατικό, δηλαδή το κατακόρυφο μαγνητικό πεδίο που προκαλείται από το εξαγωνικό πλέγμα των σκυρμιονίων που παρατηρείται συνήθως στα chiral πλέγματα. Οι πρόσφατες μελέτες SANS δείχνουν ότι το τρισδιάστατο πλέγμα, μπορεί να πραγματοποιηθεί σε ολόκληρη την περιοχή T-B του ελικοειδούς μαγνήτη. Σε μηδενικό πεδίο, η ένωση δεν παρουσιάζει καθαρή μαγνήτιση και το SkX μπορεί να θεωρηθεί ως η κατάσταση πολλαπλών q των τριών $\langle 100 \rangle$ ελικοειδών ορθογωνίων μεταξύ τους. Ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο μπορεί να προκαλέσει καθαρή μαγνήτιση και να προκαλέσει μια μηδενική κλιμάκωση chiral σπιν (αριθμός σκυρμιονίων), δημιουργώντας το THE.

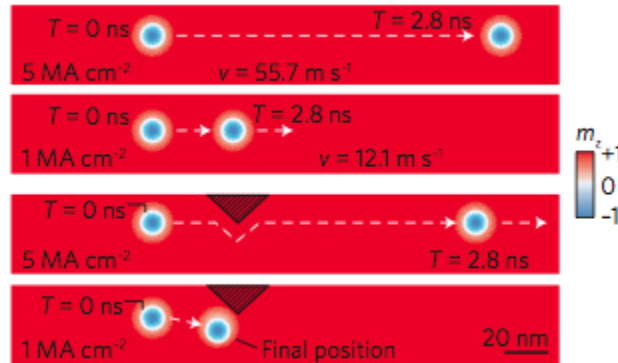
2.4.9 Δυναμική των σκυρμιονίων

Το πραγματικό πλεονέκτημα των σκυρμιονίων σε σύγκριση με άλλες μαγνητικές νανοδομές έγκειται στη δυναμική τους, ειδικά όταν συνδυάζεται με τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας ή την ηλεκτρική πόλωση.

Αναλύονται δύο κύρια πλεονεκτήματα της δυναμικής των σκυρμιονίων. Πρώτον, έχει ανακαλυφθεί ό,τι το ρεύμα οδηγός της κίνησης των σκυρμιονίων συμβαίνει σε πολύ χαμηλές πυκνότητες ρεύματος, γύρω από³⁶ 10^6Am^{-2} . Αυτό είναι εκπληκτικό δεδομένου ότι η πυκνότητα ρεύματος που απαιτείται για την κίνηση του τοιχώματος σε ένα σιδηρομαγνήτη είναι ουσιαστικά μεγαλύτερη. Η υπερβολικά χαμηλή πυκνότητα ρεύματος που αποδίδεται για την κίνηση των σκυρμιονίων είναι πολύ ενδιαφέρουσα όσον αφορά την πιθανή εφαρμογή ως φορέας πληροφοριών. Αυτό επιτρέπει τη χειραγώγηση πληροφοριών με πολύ χαμηλή κατανάλωση ενέργειας ανά μεταφορέα. Από την άλλη πλευρά, αυτές οι υπερβολικά χαμηλές κινήσεις πυκνότητας ρεύματος εμφανίζονται μόνο σε καθεστώς χαμηλής ταχύτητας. Σε αυτό το καθεστώς τα σκυρμιόνια χρειάζονται περισσότερο ή λιγότερο την ίδια πυκνότητα ρεύματος που χρησιμοποιείται για την κίνηση των μαγνητικών τοιχωμάτων.

Μια δεύτερη ενδιαφέρουσα πτυχή της δυναμικής των σκυρμιονίων είναι ο τρόπος που αυτά περνούν τις ακαθαρσίες στο μέσο. Αυτοί που μελέτησαν το ρεύμα οδηγό της κίνησης των σκυρμιονίων καθώς και την ελικοειδή δομή σε μια ορισμένη γεωμετρία συμπεριλαμβανομένης μια ακαθαρσίας, βρήκαν σχεδόν μια ταχύτητα ρεύματος ανεξάρτητη από προσμίξεις για την κατάσταση του σκυρμιονίου σε αντίθεση με την ελικοειδή δομή του, η οποία έδειξε μια ταχύτητα ρεύματος παρόμοια με τα τοιχώματα των μαγνητικών περιοχών. Αυτή η ενδιαφέρουσα ιδιότητα του σκυρμιονίου για την αποφυγή ακαθαρσιών εντοπίζεται από την εξίσωση κίνησης, όπου τα σκυρμιόνια κινούνται κάθετα στο δυναμικό. Ένα

παράδειγμα φαίνεται στο σχήμα 2.15, όπου μπορούμε να δούμε την κίνηση ενός σκυρμιονίου σε μια περιορισμένη γεωμετρία.



Σχήμα 2.15 Μεμονωμένες κινήσεις σκυρμιονίων σε τέλειες λωρίδες (οι δύο πρώτες λωρίδες). Το κάτω μέρος περιλαμβάνει δύο λωρίδες αποκοπής (μαύρα τρίγωνα).

2.4.10 Προοπτικές των σκυρμιονίων

Από την άποψη των εφαρμογών τα σκυρμιόνια έχουν αρκετά πιθανά πλεονεκτήματα σε σύγκριση με τα μαγνητικά τοιχώματα σε σιδηρομαγνήτες³⁷. Και τα δύο υπόκεινται στο φαινόμενο της μεταφοράς της ροπής και μπορούν να οδηγηθούν από ένα πολωμένο ρεύμα. Ωστόσο, παρόλο που οι εξισώσεις κίνησης φαίνεται να είναι παρόμοιες στις δύο περιπτώσεις, η φυσική είναι ουσιαστικά διαφορετική³⁸. Δηλαδή η εξίσωση κίνησης για το τοίχωμα των μαγνητικών περιοχών διαβάζεται με σταθερή πυκνότητα ρεύματος:

$$a_G \dot{X} = \beta j_x - \frac{\partial U}{\partial X} \quad (2.13)$$

Η εξίσωση (2.15) δίνει τη σχέση $\dot{X} = (\beta/a_G)j_x$ χωρίς το δυναμικό σύνδεσης. Ειδικά, όταν $\beta=0$, δεν υπάρχει κίνηση που προκαλείται από το ρεύμα j_x , όσο είναι μικρότερο από μια κρίσιμη τιμή. Αυτό ονομάζεται εγγενής σύνδεση. Λαμβάνοντας υπόψη, ότι $a_G \ll \beta$, το φαινόμενο σύνδεσης ενισχύεται σε σύγκριση με την περίπτωση του σκυρμιονίου, με συντελεστή $1/\beta$ ($\gg 1$).

Ο Rosch³⁹ εισήγαγε μια φαινομενική έκφραση για τη δύναμη της σύνδεσης ως $\vec{F}_{pm} = -4\pi M_s f (V_d/V_{pin})(\vec{V}_d/V_d)$ όπου f είναι μια συνάρτηση κλίμακας και V_{pin} είναι μια ταχύτητα που χαρακτηρίζει τη δύναμη σύνδεσης. Ο Iwasaki³⁸ μελέτησε το ρεύμα οδηγό τόσο της ελικοειδούς κατάστασης, όσο και του κρυσταλλικού σκυρμιονίου σε ένα μοντέλο με αλληλεπίδραση DMI, λαμβάνοντας την επίδραση των ακαθαρσιών λόγω της ανισοτροπίας του εύκολου άξονα. Ο Iwasaki παρατήρησε μια γενική σχέση ρεύματος-ταχύτητας για το κρυσταλλικό σκυρμιόνιο που είναι σχεδόν ανεξάρτητη από τα a_G , β και την σύνδεση, σε αντίθεση με την κίνηση της ελικοειδούς κατάστασης που δείχνει σχέσεις ρεύματος-ταχύτητας με εκείνες ενός μαγνητικού τοιχώματος³⁸. Η μειωμένη κρίσιμη πυκνότητα ρεύματος για τα κρυσταλλικά σκυρμιόνια αποδόθηκε στην παραμόρφωση του κρυστάλλου και των επιμέρους σκυρμιονίων για να αποφευχθεί το δυναμικό πρόσμιξης⁴⁰. Η αποκοπή των σκυρμιονίων έχει κάποια ομοιότητα με αυτήν των στροβίλων στους υπεραγωγούς. Η μειωμένη κρίσιμη πυκνότητα ρεύματος θα μπορούσε να επιτρέψει τη λειτουργία χαμηλής ενέργειας για

μελλοντικές συσκευές μνήμης. Συγκεκριμένα, το κόστος ενέργειας ανά μονάδα χρόνου είναι ανάλογο του τετραγώνου της πυκνότητας ρεύματος, ενώ είναι αντιστρόφως ανάλογο του χρόνου που απαιτείται για το χειρισμό ενός σταθερού όγκου πληροφοριών. Ως εκ τούτου, το κόστος ενέργειας για ένα σταθερό ποσοστό πληροφοριών είναι ανάλογο με την πυκνότητα ρεύματος. Η δυναμική των σκυρμιονίων σε περιορισμένες γεωμετρίες είναι ένα σημαντικό θέμα που πρέπει να εξετάσουμε, ειδικά για εφαρμογές. Ένα παράδειγμα παρουσιάζεται στο σχήμα 2.15, όπου παρουσιάζεται η κίνηση των σκυρμιονίων σε μια γεωμετρία πεπερασμένου εύρους και η παρουσία μιας εγκοπής. Ο Samprao με την ομάδα του μελέτησαν επίσης την σταθερότητα και την πυρήνωση των σκυρμιονίων σε νανοδίσκους⁴¹. Πρόσφατα, σε δείγματα νανοσωματιδίων B20 του πυριτίου που έχουν παρασκευαστεί, έχει παρατηρηθεί το πλέγμα των σκυρμιονίων⁴².

Τέλος, σημειώνουμε ότι η δυναμική των σκυρμιονίων είναι παρόμοια με αυτήν των μερονίων (merons), αλλά υπάρχει μια ουσιώδης διαφορά μεταξύ των δύο, δηλαδή, η τελευταία δεν είναι τοπικό αντικείμενο. Η ενέργεια ενός μερονίου, λογαριθμικά αποκλίνει από το μέγεθος του δείγματος. Πρέπει να εισαχθεί ένα ζευγάρι μερονίων και αντι-μερονίων για ένα άπειρο δείγμα. Θεωρούμε λοιπόν ότι ένα σκυρμιόνιο είναι πιο χρήσιμο ως φορέας πληροφοριών, επειδή είναι σταθερό και εντοπισμένο σωματίδιο πεπερασμένου μεγέθους που μπορεί εύκολα να χειριστεί από το ρεύμα ή το ηλεκτρικό πεδίο.

Συνοπτικά ένα σκυρμιόνιο είναι ένα τοπολογικά σταθερό σωματίδιο που παρατηρείται σε ορισμένους μαγνήτες, το οποίο έχει ιδιαίτερη δυναμική. Επειδή τα σκυρμιόνια περιλαμβάνουν πολλά σπιν, οι θερμικές και κβαντικές διακυμάνσεις αναμένεται να είναι μικρές, κάτι που είναι επωφελές για εφαρμογές μνήμης⁴³. Παραμένουν πολλά ενδιαφέροντα και σημαντικά ζητήματα που πρέπει να αντιμετωπιστούν, όπως είναι οι διαδικασίες δημιουργίας και εξόντωσης, ο σχηματισμός σύνθετων δομών (συμπεριλαμβανομένων των μερονίων), η αναστροφή ελικοειδούς, οι πιθανές τρισδιάστατες δομές σκυρμιονίων και τα φαινόμενα μη ισορροπίας κάτω από ένα ρεύμα. Από τη σκοπιά των εφαρμογών, η κατασκευή των δειγμάτων σε νανοκλίμακα είναι σημαντικό βήμα, μαζί με τον σχεδιασμό και την επίδειξη κυκλωμάτων λογικής των σκυρμιονίων που καθίσταται δυνατή από τη θεμελιώδη κατανόηση της βασικής φυσικής των σκυρμιονίων.

2.5 Αναδύομενο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο (EEMF)

Μπορεί κανείς να περιγράψει την αλληλεπίδραση μεταξύ της δομής των σπιν και των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας όσον αφορά το EEMF που εκφράζεται από τις κατευθύνσεις των σπιν. Θεωρούμε τη διπλή ανταλλαγή ένα μοντέλο όπου τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας και τα σπιν συζευγνύονται σιδηρομαγνητικά σε κάθε θέση με τον κανόνα σύζευξης του Hund. Στο ισχυρό όριο σύζευξης, η σπιν κυματοσυνάρτηση $|\chi(\vec{r})\rangle$ του ηλεκτρονίου αγωγιμότητας στο $\vec{r}$ που αντιστοιχεί στο εντοπισμένο σπιν $\vec{n}(\vec{r})$ στην εξίσωση (2.8), δίνεται από:

$$|\chi(\vec{r})\rangle = \left(\cos \frac{\theta(\vec{r})}{2}, e^{i\phi(\vec{r})} \sin \frac{\theta(\vec{r})}{2} \right)^T$$

όπου ^T σημαίνει το ανάστροφο. Επομένως, όταν ένα ηλεκτρόνιο αγωγιμότητας μεταξύ δύο θέσεων $\vec{r}$ και $\vec{r} + C\vec{\eta}_\alpha$ ($\vec{\eta}_\alpha$ είναι το μοναδιαίο διάνυσμα κατά μήκος της κατεύθυνσης α (=x,y,z), α είναι ο δείκτης του χώρου και C η πλεγματική σταθερά), το στοιχείο μήτρας δίνεται από:

$$t_\alpha(\vec{r}) = t \langle \chi(\vec{r}) | \chi(\vec{r} + C\vec{\eta}_\alpha) \rangle$$

όπου t είναι το αρχικό ολοκλήρωμα μεταφοράς των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας. Το t_a είναι γενικά πολύπλοκος αριθμός και μπορεί να γραφτεί ως $t_a = |t_a(\vec{r})|e^{iCa_a(\vec{r})}$. Ο παράγοντας φάσης $e^{iCa_a(\vec{r})}$ είναι ανάλογος με τον παράγοντα Peierls παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου και επομένως μπορούμε να θεωρήσουμε το $a_a(\vec{r})$ ως το δυναμικό του διανύσματος ενός αποτελεσματικού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Υποθέτοντας την αργά μεταβαλλόμενη διαμόρφωση σπιν πάνω από την πλεγματική σταθερά C , λαμβάνουμε $a_a(\vec{r}) = -i\langle\chi(\vec{r})|\partial_a\chi(\vec{r})\rangle = \frac{1}{2}\partial_a\Phi(1 - \cos\theta)$. Από αυτήν την έκφραση μπορεί κανείς εύκολα να επιβεβαιώσει το αναδύμενο μαγνητικό πεδίο b_z που σχετίζεται με τη στερεά γωνία ως:

$$b_z = \frac{\partial a_y}{\partial x} - \frac{\partial a_x}{\partial y} = \frac{1}{2}\vec{n} \cdot \left(\frac{\partial \vec{n}}{\partial x} \times \frac{\partial \vec{n}}{\partial y} \right)$$

Επομένως, η συνολική μαγνητική ροή που σχετίζεται με ένα σκυρμιόνιο είναι $2\pi N_{sk}$. Αυτές οι σκέψεις μπορούν εύκολα να γενικευτούν στην τρισδιάστατη περίπτωση και επίσης στο αναδύμενο ηλεκτρικό πεδίο ως:

$$b_a = \frac{1}{2}\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}\vec{n} \cdot (\partial_\beta\vec{n} \times \partial_\gamma\vec{n}) \quad (2.14\alpha)$$

$$e_a = \vec{n} \cdot (\partial_a\vec{n} \times \partial_t\vec{n}) \quad (2.14\beta)$$

όπου $\partial_\mu = \partial/\partial\chi_\mu$, $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}$ είναι ο εντελώς αντισυμμετρικός τανυστής σε τρεις διαστάσεις και η σύζευξη με τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας περιγράφεται από τη Lagrangian:

$$L_{int} = j_\mu \alpha_\mu \quad (2.15)$$

με το j_μ να είναι η πυκνότητα και η πυκνότητα ρεύματος των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας, όπως στην περίπτωση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου Maxwell A_μ . Εδώ μ είναι ο δείκτης χώρου-χρόνου.

Αναφέρουμε εδώ ότι η γνωστή ροπή των σπιν μεταδίδεται από την εξίσωση (2.15). Δηλαδή, η παραλλαγή του α_μ σε σχέση με το $\vec{n}$ δίνεται από:

$$\delta\alpha_\mu = \frac{1}{2}\delta\vec{n} \cdot (\vec{n} \times \partial_\mu\vec{n}) \quad (2.16)$$

Σε συνδυασμό με την παραλλαγή του όρου της φάσης Berry, ω , ως $\delta\omega = -\frac{1}{2}\delta\vec{n} \cdot (\vec{n} \times \partial_t\vec{n})$, οδηγεί στην εξίσωση κίνησης ως:

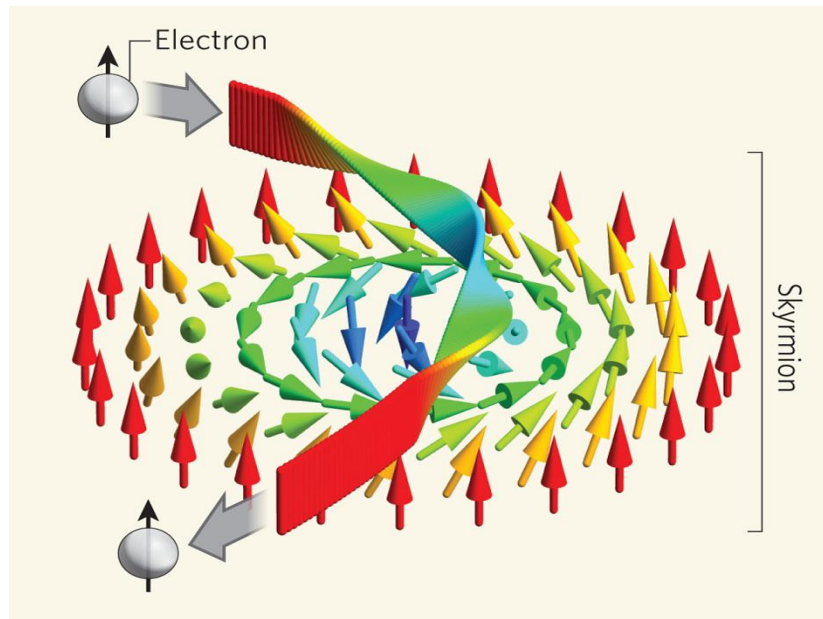
$$[\partial_t + (\vec{j} \cdot \nabla)]\vec{n}(r, t) = 0$$

το οποίο περιγράφει το ρεύμα οδηγό της υφής του σπιν με χωρικά μεταβαλλόμενο $\vec{n}$.

2.6 Τοπολογικό φαινόμενο Hall (Topological Hall effect, THE)

Μια συνέπεια της ύπαρξης του EEMF είναι το τοπολογικό φαινόμενο Hall (THE). Αυτό δεν είναι τίποτε άλλο παρά μια συνεισφορά στο κανονικό φαινόμενο Hall λόγω της ύπαρξης σκυρμιονίων στο υλικό τα οποία εκτρέπουν τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας προς μια

κατεύθυνση (σχήμα 2.16). Αυτό οφείλεται στη δύναμη Lorentz που εμφανίζεται λόγω του πεδίου b_z του σκυρμιονίου. Λόγω αυτής της δύναμης τα ηλεκτρόνια εκτρέπονται και συγκεντρώνονται σε μια άκρη του υλικού με αποτέλεσμα να προκαλούν κάποια τάση Hall.



Σχήμα 2.16 Σχηματική απεικόνιση της εκτροπής ενός ηλεκτρονίου αγωγιμότητας από ένα σκυρμίνιο.

2.7 Skyrmion Hall Effect (SHE)

Ταυτόχρονα με την εκτροπή των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας το ίδιο το σκυρμίνιο μετακινείται κάθετα στην κίνηση του ρεύματος. Κατ' ακρίβεια, κατά την εφαρμογή πολωμένου σπιν ρεύματος σ' ένα υλικό που περιέχει σκυρμίνια, τα σκυρμίνια ξεκινούν να μετακινούνται προς τη φορά των ηλεκτρονίων αγωγιμότητας (αντίθετα δηλαδή με τη συμβατική φορά ρεύματος) λόγω ενός φαινομένου που ονομάζεται Spin Transfer Torque (STT) κατά το οποίο τα σπιν του υλικού περιστρέφονται κατά λίγο, λόγω της ροπής που ασκείται σε αυτά από τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας που περνούν από μέσα τους. Αυτή η περιστροφή των σπιν είναι ακριβώς τέτοια, ώστε ολόκληρο το σκυρμίνιο να μετατοπίζεται. Κατά την κίνηση αυτή το σκυρμίνιο εκτελεί μια κάθετη προς το ρεύμα κίνηση. Η συνιστώσα της κάθετης προς ταχύτητας εξαρτάται από τη σταθερά α που καθορίζει το μέτρο του Gilbert και την σταθερά β , που καθορίζει το μέγεθος του όρου της μη διαβατικής ροπής που ασκείται στα σπιν στην εξίσωση LLG, εξίσωση (2.12). Η μετατόπιση τους αυτή προκαλεί τη συγκεντρωμένη των σκυρμιονίων σε μια άκρη του υλικού κατ' αναλογία με το φαινόμενο Hall στο οποίο παρατηρείται συγκέντρωση ηλεκτρονίων στη μια άκρη του υλικού.

Βιβλιογραφία

- [1] Rashba E.I. Properties of semiconductors with an extremum loop. I. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop. *Sov. Phys. Solid State* **V.2**, p.1109-1122, (1960)

- [2] Edelstein V.M. Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems. *Solid State Commum.* **V.73**, p.233-235, (1990)
- [3] Valenzuela S.O. in spin current (eds Maekawa, S. et.al) ch.11 (Oxford University Press, 2012)
- [4] Dzyaloshinskii I.A. Thermodynamic theory of ‘weak’ ferromagnetism of antiferromagnetics. *J. Phys. Chem. Solids* **V.4**, p.241-255, (1958)
- [5] Moriya T. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. *Phys. Rev.* **V.120**, p.91-98, (1960)
- [6] Fert A. & Levy P.M. Role of anisotropic exchange interactions in determining the properties of spin-glasses. *Phys. Rev. Lett* **V.44**, p. 1538-1541, (1980)
- [7] Fert A. Magnetic and transport properties of metallic multilayers. *Mater. Sci. Forum* **V.59-60**, p.439-480, (1990)
- [8] Bode M. et.al. Chiral magnetic order at surfaces driven by inversion asymmetry. *Nature* **V.447**, p.190-193, (2007)
- [9] Nechaev I.A. et.al. Hole dynamics in a two-dimensional spin-orbit coupled electron system: theoretical and experimental study of the Au(111) surface state. *Phys. Rev.* **B80**, 113402, (2009)
- [10] Bogdanov A.N. & Rößler U.K. Chiral symmetry breaking in magnetic thin films and multilayers. *Phys. Rev. Lett.* **V.87**, 037203, (2001)
- [11] Nagaosa N. & Tokura Y. Topological properties and dynamics of magnetism of magnetic skyrmions. *Nat. Nanotechnol.* **V.8**, p.899-911, (2013)
- [12] Soumyanarayanan A., Reyren N., Fert A., Panagopoulos Ch. Emergent phenomena induced by spin-orbit coupling at surfaces and interfaces. *Nature* **V.539**, p.509-517, (2016)
- [13] Heinze S. et.al. Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two-dimensions. *Nat. Phys.* **V.7**, 713-718, (2011)
- [14] Parkin S.S.P., Hayashi M. and Thomas L. Magnetic domain-wall racetrack memory. *Science* **V.320**, p.190-194, (2008)
- [15] Schwarz A.S. Topology for physicists. Book *Springer*, Berlin (1994)
- [16] Rubinstein D., Math J. Sine-Gordon equation. *Journal of mathematical physics.* **V.11**, p.258, (1970)
- [17] Skyrme T.H.R. A nonlinear field theory. *Proc. R. Soc. Cond. Ser.* **A260**, p.127, (1961)

- [18] Belavin A.A. and Polyakov A.M. Two-dimensional Heisenberg model and pseudoparticle solutions. *JETP Lett.* **V.22**, p.797, (1975)
- [19] Mühlbauer S., Binz., Jonietz F., Pfleiderer C., Rosch A., Neubauer A., Georgii T. and Böni P. Skyrmion lattice in a chiral magnet. *Science* **V.323**(5916): p.915-919, (2009)
- [20] Skyrme T.H.R. A unified field theory of mesons and baryons. *Nucl. Phys.* **V.31**, p.556-569, (1962)
- [21] Τέγγερης Χρ., «Κεφάλαιο 2: Μαγνητικά σκίρμιον και τα χαρακτηριστικά τους», σελ.12-18, Διπλωματική Εργασία *Αλληλεπιδράσεις μεταξύ μαγνητικών σκίρμιον*, Πανεπιστήμιο Κύπρου, Κύπρος 2015
- [22] Sondhi S.L., Karlhede A., Kivelson S.A. & Rezayi E.H. Skyrmions and the crossover from the integer to fractional quantum Hall effect at small Zeeman energies. *Phys. Rev. B* **47**, p. 16419-16426, (1993)
- [23] Rößler U.K., Bogdanov N. & Pfleiderer C. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. *Nature* **V.442**, p.797-801, (2006)
- [24] Neubauer A., Pfleiderer C., Binz B., Rosch A., Ritz R., Niklowitz D.G. & Böni P. Topological Hall effect in the phase of MnSi. *Phys. Rev. Lett.* **V.102**(18), 186602, (2009)
- [25] Thessieu C., Pfleiderer C., Stepanov A.N. & Flouquet . Field dependence of the magnetic quantum phase transition in MnSi. *Journal of Physics: Condensed Matter.* **V.9**(31): 6677, (1997)
- [26] Minhyea Lee, Kang W., Onose Y., Tokura Y. & Ong N.P. Unusual Hall effect anomaly in MnSi under pressure. *Phys. Rev. Lett.* **V.102**(18): 186601, (2009)
- [27] Nagaosa N., Tokura Y. Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions. *Nature Nanotechnology* **V.8**, p.899-911, (2013)
- [28] Fert A., Cros V. & Sampaio J. Skyrmions on the track. *Nature Nanotech.* **V.8**, p. 152-156, (2013)
- [29] Landau L.D., Lifshitz E.M. & Pitaevskii L.P. Book *Electrodynamics of continuous medias*, **V.8**, ch.5, p.178-179,, (Elsevier, 2008)
- [30] Ritz R. et.al. Giant generic topological Hall resistivity of MnSi under pressure. *Phys. Rev. B* **87**, 134424, (2013)
- [31] Seki S., Yu X.Z., Ishimata s. & Tokura Y. Observation of skyrmions in a multiferroic material. *Science* **V.336**, p.198-201, (2012)
- [32] Bos J-W. G., Colin C.V. & Palstra T.T.M. Magnetoelectric coupling in the cubic ferrimagnet Cu₂OSeO₃. *Phys. Rev. B* **78**, 094416, (2018)

- [33] Jia C., Onoda S., Nagaosa N. & Han J.H. Microscopic theory of spin-polarization coupling in multiferroic transition metal oxides. *Phys. Rev. B* **76**, 144424, (2007)
- [34] Zang J., Mostovoy M., Han J.H. & Nagaosa N. Dynamics of skyrmion crystals in metallic thin films. *Phys. Rev. Lett.* **V.107**, 136804, (2011)
- [35] Yufan Li Y. et.al. Robust formation of skyrmions and topological Hall effect anomaly in epitaxial thin films of MnSi. *Phys. Rev. Lett.* **V.110**, 117202, (2013)
- [36] Jonietz F., Mühlbauer S., Pfleiderer C., Neubauer A., Bauer A., Münzer W., Adams T., Georgii R., Böni P., Duine R.A., et.al. Spin transfer torques in MnSi at ultralow current densities. *Science* **V.330**(6011): 1648-1651, (2010)
- [37] Thiaville A., Nakatani Y., Miltat J. & Suzuki Y. Micromagnetic understanding of current-driven domain wall motion in patterned nanowires. *Europhys. Lett.* **V69**, p.990-996, (2005)
- [38] Iwasaki J., Mochikuzi M. & Nagaosa N. Universal current-velocity relation of skyrmion motion in chiral magnets. *Nature Commun.* **V.4**, p.1463, (2013)
- [39] Everschor K., et.al. Rotating skyrmion lattices by spin torques and field or temperature gradients. *Phys. Rev. B* **86**, 054432, (2012)
- [40] Liu Y-H., & Li Y-Q. A mechanism to pin skyrmions in chiral magnets. *J. Phys. Condens. Matter.* **V.25**, 076005, (2013)
- [41] Sampaio J., Cros V., Rohart S., Thiaville A. & Fert A. Nucleation stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures. *Nature Nanotech.* **V.8**, p.839-844, (2013)
- [42] Yu X.Z., et.al Observation of the magnetic skyrmion lattice in a MnSi nanowire by LTEM. *Nano Lett.* **V.13**, p.3755-3759, (2013)
- [43] Felser C. Skyrmions. *Angew. Chem. Int. Ed.* **V.52**, p.1631-1634, (2013)

Λογισμικό VAMPIRE-Περιγραφή

Οι περισσότερες προσομοιώσεις σήμερα χρησιμοποιούν μικρομαγνητικά υλικά για να προβλέψουν και να κατανοήσουν τη συμπεριφορά των μαγνητικών νανοϋλικών. Ωστόσο, οι εξελίξεις στην πολυπλοκότητα των μαγνητικών υλικών και η αυξανόμενη σημασία των σύνθετων φυσικών επιδράσεων, όπως, οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής, η μεταφορά των σπιν και η μαγνητική εγγραφή με τη βοήθεια θερμότητας, ωθούν τα όρια αυτού που μπορεί να διαμορφωθεί ρεαλιστικά με τα μικρομαγνητικά. Η ατομιστική προσομοίωση και στην ηλεκτρονική δομή με επεξεργασία ενός μαγνητικού υλικού στη φυσική κλίμακα ατομικού μήκους, είναι ιδανική για την προσομοίωση μαγνητικών νανοϋλικών.

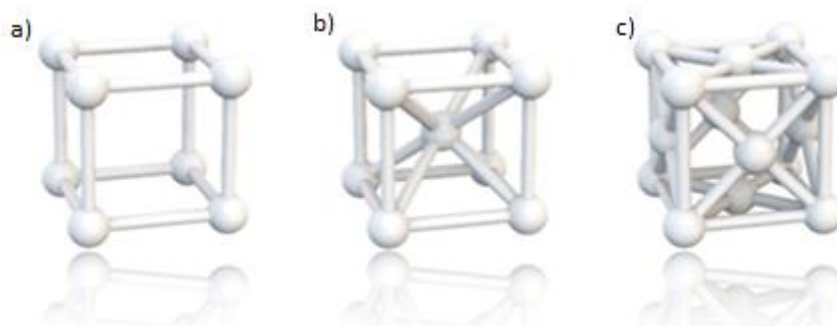
Το VAMPIRE (Vascular Assessment and Measurement Platform for Images of the Retina)¹ είναι ένα δωρεάν πακέτο λογισμικού ανοιχτού κώδικα το οποίο κάνει ατομιστικές προσομοιώσεις μαγνητικών υλικών, εύκολα προσβάσιμες τόσο από θεωρητικούς, όσο και από πειραματικούς ερευνητές.

Το VAMPIRE είναι απόλυτα ανοιχτό, επιτρέποντας τον ανεξάρτητο έλεγχο της εφαρμογής των αλγορίθμων του και την ικανότητα του καθενός να συμβάλλει στη λειτουργικότητά του, η οποία ενθαρρύνεται ενεργά. Ο κώδικας είναι επίσης εντελώς δωρεάν για προσωπικούς, ακαδημαϊκούς ή εμπορικούς σκοπούς.

3.1 Λογισμικό VAMPIRE

Το VAMPIRE² είναι ένα ανοικτό πακέτο λογισμικού προσομοίωσης, για την ατομιστική προσομοίωση των μαγνητικών υλικών. Στόχος του VAMPIRE είναι να παράσχει ένα πρότυπο εργαλείο ατομιστικής προσομοίωσης των μαγνητικών υλικών με υψηλή απόδοση. Χρησιμοποιώντας το VAMPIRE μπορούμε να υπολογίσουμε τις μαγνητικές ιδιότητες μιας ευρείας ποικιλίας μαγνητικών υλικών, συμπεριλαμβανομένης της σιδηρομαγνητικής συμπεριφοράς.

Τα υλικά που επεξεργάζονται σε μια ευρεία ποικιλία των κρυσταλλικών δομών και στο μαγνητισμό, μπορούν να έχουν επιπτώσεις στις μακροσκοπικές μαγνητικές ιδιότητες. Το VAMPIRE περιλαμβάνει πιο κοινές δομές κρυστάλλου (Σχήμα 3.1), καθιστώντας το απλό να ορίσει διαφορετική ατομική γεωμετρία.



Σχήμα 3.1 Οι δομές του κρυστάλλου που περιλαμβάνει το VAMPIRE, α) το απλό κυβικό (SC), b) το χωροκεντρομένο κυβικό (BCC) και c) το εδροκεντρομένο κυβικό (FCC).

Επίσης, το VAMPIRE περιλαμβάνει τη δυνατότητα στο χρήστη να δημιουργήσει διάφορα σχήματα με λιθογραφία. Τέτοια λιθογραφικά χαρακτηριστικά μπορούν να διαμορφωθούν από διαφορετικά υλικά για να δημιουργήσουν πιο σύνθετα συστήματα ή συσκευές.

Το VAMPIRE χρησιμοποιεί μια απλή μορφή αρχείου κειμένου για να καθορίσει και να εκτελέσει μια ατομιστική προσομοίωση. Ένα σύστημα μπορεί συχνά να οριστεί χρησιμοποιώντας μια απλή εντολή επιτρέποντας την ταχεία προτυποποίηση ενός μαγνητικού συστήματος, ενώ καλύπτουν πιο κοινούς υπολογισμούς. Ένα ευρύ φάσμα των δεδομένων από την προσομοίωση επιτρέπει μια λεπτομερή ανάλυση του υπό εξέταση συστήματος.

Το VAMPIRE είναι διαθέσιμο σε δυαδική μορφή. Ο κώδικας του VAMPIRE είναι διαθέσιμος σε σειριακή και παράλληλη μορφή για εκδόσεις Linux, Microsoft OS X και Windows. Για τις Linux και Microsoft OS X εκδόσεις η εγκατάσταση του VAMPIRE γίνεται μέσω του install.sh. Ενώ για εκδόσεις Windows το δυαδικό αρχείο έχει τη δυνατότητα αναδιανομής και πρέπει να είναι στον ίδιο κατάλογο με το αρχείο εισόδου (input file) , ωστόσο για να εκτελείται ο κώδικας πρέπει πρώτα να εγκατασταθεί το Microsoft Visual C++ Redistributable.

Τέλος, το λογισμικό VAMPIRE, υποστηρίζει την εισαγωγή του σπιν Χαμιλτονιανής, επιτρέποντας προσομοιώσεις πολλαπλής κλίμακας χρησιμοποιώντας ab-initio παραμέτρους προσομοίωσης.

3.1.1 Ατομιστικό μοντέλο σπιν

Η ατομιστική μοντελοποίηση των μαγνητικών υλικών παρέχει λεπτομέρειες σχετικά με τις υποκείμενες φυσικές διεργασίες που διέπουν τις μακροσκοπικές ιδιότητες και επιτρέπουν την προσομοίωση από πολύπλοκες επιδράσεις, όπως η επιφάνεια ανισοτροπίας και η δυναμική του σπιν.

Το ατομιστικό μοντέλο των μαγνητικών υλικών, προέρχεται από το 1925 από τον Ising³ ως το πρώτο μοντέλο μετάβασης φάσης σε έναν σιδηρομαγνήτη. Το μοντέλο Ising⁴ αποτελεί ένα μαθηματικό μοντέλο σιδηρομαγνητισμού από τον Ernst Ising, ο οποίος έλυσε την μονοδιάστατη περίπτωση του το 1925. Στην μονοδιάστατη περίπτωση όμως δεν παρατηρείται μετάβαση φάσης και λανθασμένα ο Ernst Ising συμπεράνε ότι κάτι τέτοιο θα συμβαίνει και σε ανώτερες διαστάσεις. Η θεωρία αυτή του Ernst Ising διαψεύστηκε το 1944 από τον Lars Onsager, ο οποίος ήταν και ο πρώτος που έλυσε το δισδιάστατο πρότυπο με απουσία μαγνητικού πεδίου και επέδειξε, ότι παρατηρείται μετάβαση φάσης.

Το μοντέλο Ising έχει spin-up και spin-down αναφορές και είναι επιδεκτικό σε συστήματα τουλάχιστον δύο διαστάσεων. Αν και ακόμα ευρέως χρησιμοποιείται στη μελέτη της μετάβασης φάσης, περιορίζεται στη δυνατότητα εφαρμογής του σε μαγνητικά υλικά που δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για δυναμικές προσομοιώσεις. Μια φυσική επέκταση του μοντέλου Ising είναι να επιτρέψει στα ατομικά σπιν να ποικίλλουν ελεύθερα σε τριδιάστατο χώρο, που θα αποφέρει το κλασσικό μοντέλο Heisenberg, όπου οι επιπτώσεις της κβαντικής μηχανικής στα ατομικά σπιν είναι παραμελημένες. Έτσι, η ατομιστική προσομοίωση του κλασσικού μοντέλου Heisenberg επιτρέπει τη μελέτη μετάβασης φάσης και τη μελέτη πεπερασμένων μεγεθών σε απλά μαγνητικά συστήματα.

Το μοντέλο Ising βασίζεται σε δύο αλγόριθμους⁴, τον αλγόριθμο Metropolis και τον αλγόριθμο Wolff. Ο αλγόριθμος Metropolis που πήρε το όνομά του από εφευρέτη του τον Nicolas Metropolis, είναι ένας αλγόριθμος με δυναμική single-spin-up και γενική χρήση. Αντίθετα, ο αλγόριθμος Wolff, που πήρε το όνομά του από τον Ulli Wolff, είναι ένας cluster αλγόριθμος με εξειδικευμένη εφαρμογή στο μοντέλο Ising.

Η ατομιστική προσομοίωση των μαγνητικών υλικών είναι ένα απαραίτητο εργαλείο για την κατανόηση των διεργασιών που διέπουν την συμπεριφορά των μαγνητικών

νανοϋλικών, όπως η επιφανειακή ανισοτροπία, η ατομική μαγνητική ροπή, η επίδραση της θερμοκρασίας στις ιδιότητες των μαγνητικών υλικών. Το ατομιστικό μοντέλο σπιν είναι σε θέση να υπολογίσει με αποτελεσματικότητα τις φαινομενολογικές παραμέτρους που χρησιμοποιούνται σε μεγαλύτερης κλίμακας προσομοιώσεις, όπως η ανισοτροπία.

Η ατομιστική μοντελοποίηση των συστημάτων σπιν μπορεί να βασιστεί σε δύο διαφορετικές προσεγγίσεις: την μικρομαγνητική προσέγγιση και την ab-initio προσέγγιση. Σε μια μικρομαγνητική προσέγγιση, αντιμετωπίζονται οι μαγνητοστατικές αλληλεπιδράσεις όπου τα άτομα ομαδοποιούνται σε μια μακροκυψελίδα (microcell), όπου η μαγνήτιση είναι ομοιόμορφη. Αυτή η διαδικασία λειτουργεί με πολλαπλές διεργασίες που εξασφαλίζει άριστη απόδοση και υψηλή θερμοκρασία.

Το πλεονέκτημα του ατομιστικού μοντέλου σπιν πέρα από τον μικρομαγνητισμό είναι ότι ασχολείται ατομικά με την παραλλαγή τοπικών ιδιοτήτων σε πραγματικά υλικά, όπως, διεπαφές, ελαττώματα τραχύτητες κλπ. Η διακριτική διατύπωση επιτρέπει επίσης την προσομοίωση υψηλών θερμοκρασιών πάνω από τη θερμοκρασία Curie, όπου συνήθως η συνεχής μικρομαγνητική διατύπωση διασπάται. Τέτοια δράση παίζει συχνά κεντρικό ρόλο σε τρέχοντα προβλήματα στον μαγνητισμό.

Ομοίως για την ab-initio προσέγγιση η αποτελεσματική χαρτογράφηση ενός ατομιστικού μοντέλου σπιν επιτρέπει να ισχύουν οι πλήρης κβαντομηχανικές ιδιότητες σε πολύ μεγαλύτερα συστήματα και την εξέταση των δυναμικών επιδράσεων σε πολύ μεγαλύτερα χρονικά περιθώρια.

Ατομιστικές προσομοιώσεις γίνονται μέσω του κώδικα VAMPIRE. Ο κώδικας VAMPIRE έχει σχεδιαστεί να προσομοιώσει νανοσωματίδια, ορθογωνικές ταινίες, επιφάνειες ανισοτροπίας κ.α.

3.1.2 Χαμιλτονιανή σπιν

Η βάση του ατομιστικού μοντέλου σπιν είναι η Χαμιλτονιανή σπιν, η οποία περιγράφει τις θεμελιώδεις αλληλεπιδράσεις που εξαρτώνται από τα σπιν σε ατομικό επίπεδο (αγνοώντας την επίδραση της δυναμικής και κινητικής ενέργειας και τις συσχετίσεις ηλεκτρονίων). Η Χαμιλτονιανή σπιν ορίζεται από τη σχέση⁵:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} \vec{J}_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - k_2 \sum_i S_z^2 - \mu_s \sum_i \vec{H}_{app} \vec{S}_i \quad (3.1)$$

περιγράφοντας την ανταλλαγή, την μονοαξονική ανισοτροπία και το πεδίο αντίστοιχα. Σημαντικοί παράμετροι είναι το ολοκλήρωμα ανταλλαγής $\vec{J}_{ij}$, η σταθερά ανισοτροπίας (anisotropy constant) k_2 και η ατομική μαγνητική ροπή (atomic spin moment) μ_s , $\vec{S}_i$ είναι ένα μοναδιαίο διάνυσμα που περιγράφει τον προσανατολισμό του σπιν. Σε πιο μαγνητικά υλικά οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής είναι κυρίαρχη συνεισφορά, συνήθως από δύο τάξεις και συνεπάγεται τον ατομικό προσανατολισμό από τις κατευθύνσεις των σπιν. Για σιδηρομαγνητικά υλικά⁶ ευνοείται ο παράλληλος σιδηρομαγνητικός προσανατολισμός ($\uparrow\uparrow$) και το ολοκλήρωμα ανταλλαγής παίρνει θετικές τιμές ($\vec{J}_{ij} > 0$), ενώ για αντισιδηρομαγνητικά υλικά ευνοείται ο αντιπαράλληλος αντισιδηρομαγνητικός προσανατολισμός ($\uparrow\downarrow$) και το ολοκλήρωμα ανταλλαγής παίρνει αρνητικές τιμές ($\vec{J}_{ij} < 0$).

Ενώ οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής καθορίζονται από την τάξη των σπιν, είναι συνήθως ιστροπικές και δεν υπάρχει κανένας προτιμητέος προσανατολισμός σε όλο το σύστημα των σπιν. Τα περισσότερα μαγνητικά υλικά είναι ανισότροπα επειδή τα σπιν έχουν προσανατολισμό στο χώρο που τίθεται σε ατομικό επίπεδο και οφείλεται στο περιβάλλον του

κρυστάλλου και ονομάζεται μαγνητοκρυσταλλική ανισοτροπία (magnetocrystalline anisotropy). Στο μοντέλο αυτό έχουμε συνήθως μονοαξονική ανισοτροπία, όπου τα σπιν προτιμούν να βρίσκονται κατά μήκος ενός προτιμώμενου ενιαίου άξονα, που είναι γνωστός ως εύκολος άξονας (easy axis). Η δύναμη της ανισοτροπίας καθορίζεται από σταθερά ανισοτροπίας k_2 , όπου όταν η k_2 παίρνει θετικές τιμές, η δύναμη της ανισοτροπίας προτιμά την ευθυγράμμιση της κατά του z-άξονα, ενώ όταν η σταθερά ανισοτροπίας παίρνει αρνητικές τιμές, η δύναμη της ανισοτροπίας προτιμά την ευθυγράμμιση της γύρω από το επίπεδο x-y.

Τέλος, περιγράφεται η ζεύξη σπιν για τα εξωτερικά συστήματα εφαρμοσμένου πεδίου η πεδίου Zeeman $\vec{H}_{app}$. Το πεδίο Zeeman χρησιμοποιείται για να αντιστρέψει τον προσανατολισμό των σπιν και μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε προσομοιώσεις για να υπολογίσει π.χ. τον βρόχο υστέρησης (hysteresis loops).

3.1.3 Δυναμική του σπιν (spin dynamics)

Η Χαμιλτονιανή του σπιν περιγράφει την ενέργεια του συστήματος, αλλά δεν μας δίνει πληροφορίες για τη δυναμική συμπεριφορά. Γι' αυτό το λόγο χρησιμοποιείται η εξίσωση Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) για να περιγράψει την δυναμική συμπεριφορά του ατομικού σπιν. Η εξίσωση LLG δίνεται από τη σχέση^{5,7}:

$$\frac{\partial \vec{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{(1 + \lambda^2)} [\vec{S}_i \times \vec{H}_{eff}^i + \lambda \vec{S}_i \times (\vec{S}_i \times \vec{H}_{eff}^i)] \quad (3.2)$$

όπου $\vec{S}_i$ είναι το μοναδιαίο διάνυσμα που αναπαριστά την κατεύθυνση της ατομικής μαγνητικής ροπής στην τοποθεσία i, γ είναι ο γυρομαγνητικός λόγος (gyromagnetic ratio) και $\vec{H}_{eff}^i$ είναι το καθαρό μαγνητικό πεδίο σε κάθε σπιν. Η ατομιστική εξίσωση LLG περιγράφει την ατομική μαγνητική ροπή, που περιλαμβάνεται από την πρώτη αρνητική παράγωγο της Χαμιλτονιανής σπιν^{6,7} τέτοια ώστε:

$$\vec{H}_{eff}^i = -\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i} \quad (3.3)$$

όπου μ_s είναι η ατομική μαγνητική ροπή (local spin moment). Η ροπή του σπιν εκφράζεται σε Tesla, ενώ η Χαμιλτονιανή σπιν $\mathcal{H}$ σε Joule. Η εξίσωση LLG ενσωματώνεται αριθμητικά χρησιμοποιώντας την αριθμητική Heun⁵, η οποία επιτρέπει την χρονική εξέλιξη συστήματος του σπιν κατά την προσομοίωση.

3.1.4 Εισαγωγή ab-initio παραμέτρων

Ένα προηγμένο χαρακτηριστικό γνώρισμα του VAMPIRE είναι η ικανότητα ενσωμάτωσης πληροφοριών από ab-initio υπολογισμούς. Αυτό μπορεί επίσης να περιλαμβάνει εντοπισμένες μαγνητικές ροπές, αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής και μαγνητικές ανισοτροπίες, επιτρέποντας αληθινές πολλαπλές κλίμακες υπολογισμού μαγνητικών υλικών.

3.1.5 Μοντέλο σύνθετων μαγνητικών υλικών

Εκτός από τα απλά υλικά που αποτελούνται από μόνο ένα είδος ατόμου, το VAMPIRE έχει επίσης την ικανότητα να μοντελοποιεί πολύ πιο περίπλοκα συστήματα, όπως κράματα, σιδηρομαγνήτες και αντισιδηρομαγνήτες, για ένα παράδειγμα με αλληλεπιδράσεις ανισότροπης ανταλλαγής. Ο κώδικας μπορεί επίσης να δεχθεί αποτελεσματικές παραμέτρους που υπολογίζονται από ab-initio υπολογισμούς, έτσι ώστε να μπορούν εύκολα να υπολογιστούν οι μακροσκοπικές ιδιότητες, όπως η συνεκτικότητα και η θερμοκρασία Curie.

3.1.6 Αντισιδηρομαγνήτες

Η χρήση του ατομιστικού μοντέλου επιτρέπει στο VAMPIRE να προσομοιώνει εύκολα τους αντισιδηρομαγνήτες στη φυσική τους κλίμακα. Σε αντίθεση με τους σιδηρομαγνήτες, οι αντισιδηρομαγνητικές ιδιότητες είναι εγγενώς συζευγμένες με την κρυσταλλική δομή, οδηγώντας σε διαφορετική διαμόρφωση κόκκων. Το VAMPIRE είναι ικανό να υπολογίζει την κατάσταση των κόκκων, την θερμοκρασία Néel και το φαινόμενο της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής όταν συνδέεται ένας σιδηρομαγνήτης και ένας αντισιδηρομαγνήτης.

3.1.7 Δημιουργία ατομικού συστήματος

Η δημιουργία ενός συστήματος που προσομοιώνει συχνά, απαιτεί τη χρήση εξωτερικού λογισμικού, το οποίο στη συνέχεια πρέπει να προσαρμοστεί στη σωστή μορφή αρχείου. Το VAMPIRE ενσωματώνει τις εγκαταστάσεις παραγωγής του συστήματος στον πυρήνα του, για να είναι απίστευτα εύκολο να ορίσουμε το σύστημά μας και να αρχίσουμε να παράγουμε άμεσα αποτελέσματα.

3.1.8 Μέθοδοι προσομοίωσης τελευταίας τεχνολογίας

Το VAMPIRE εφαρμόζει μια μεγάλη ποικιλία μεθόδων προσομοίωσης για να δώσει τη δυνατότητα προσομοίωσης της δυναμικής του σπιν και των ιδιοτήτων ισορροπίας. Σε συνδυασμό με τα τυπικά προγράμματα, το VAMPIRE παρέχει ένα ευρύ φάσμα εργαλείων για την προσομοίωση και το χαρακτηριστικό κάθε μαγνητικού συστήματος.

3.2 Απαιτήσεις συστήματος

Δημιουργώντας ένα σύστημα για την προσομοίωση συχνά απαιτείται η χρήση ενός εξωτερικού λογισμικού, το οποίο στη συνέχεια θα πρέπει να διαμορφωθεί ανάλογα με τη σωστή μορφή αρχείου. Το VAMPIRE ενσωματώνει ένα σύστημα παραγωγής στον πυρήνα της ώστε να είναι απίστευτα εύκολο να το ορίσει το σύστημά μας και να αρχίσει να παράγει τα αποτελέσματα αμέσως.

Το λογισμικό VAMPIRE είναι γενικά φορητό σε συστήματα Linux, Unix Mac OS X, και Windows με μια σειρά από διαφορετικούς μεταγλωττιστές. Από τη σχεδιάσή του το VAMPIRE έχει μια πολύ ελάχιστη εξάρτηση από εξωτερικές βιβλιοθήκες.

Το VAMPIRE είναι υπεύθυνο για τη σχεδίαση υψηλών υπολογιστικών συμπλεγμάτων απόδοσης και είναι επεκτάσιμο σε χιλιάδες επεξεργασίες και ως τέτοια είναι η συνιστώμενη πλατφόρμα, εάν έχουμε πρόσβαση σε κατάλληλους χώρους.

3.2.1 Απαιτήσεις υλικού

Το VAMPIRE έχει δοκιμαστεί σε μια ευρεία ποικιλία επεξεργασμών. Οι απαιτήσεις του VAMPIRE στη μνήμη, είναι σχετικά μέτριες για τα περισσότερα συστήματα, αν και περισσότερες προσομοιώσεις απαιτούν περισσότερη μνήμη. Το VAMPIRE είναι υπολογιστικά περιορισμένο και τόσο γρήγορο που το κάνει απ' τα καλύτερα λογισμικά.

3.3 Η χρήση του λογισμικού VAMPIRE

Το VAMPIRE είναι ένα ισχυρό πακέτο, πολλών διαφορετικών συστημάτων για τον καθορισμό των παραμέτρων όπως η απομαγνητότητα (coercivity), η θερμοκρασία Curie, η δυναμική αντιστροφής (reversal dynamics), η στατιστική συμπεριφορά, η μαγνήτιση κ.α. Παρακάτω γίνεται επισκόπηση για τις δυνατότητες του VAMPIRE και πως αυτές μπορούν να χρησιμοποιηθούν. Τα χαρακτηριστικά του VAMPIRE χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες:

- 1) Παράμετροι του υλικού
- 2) Παράμετροι δομής
- 3) Παράμετροι προσομοίωσης

Οι παράμετροι του υλικού καθορίζουν τις μαγνητικές ιδιότητες των ατόμων, συμπεριλαμβανομένων, των μαγνητικών ροπών, τις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής, τη σταθερά απόσβεσης (damping constant) κ.α. Το λογισμικό VAMPIRE περιλαμβάνει την δυνατότητα για τη μελέτη μέχρι εκατό καθορισμένων υλικών, καθώς και τις παραμέτρους του υλικού που ελέγχουν την προσομοίωση των κραμάτων, των σωματιδίων καθώς και λιθογραφικά καθορισμένα πρότυπα.

Οι παράμετροι της δομής καθορίζουν τις ιδιότητες των υλικών, όπως το σύστημα του μεγέθους, το μέγεθος των σωματιδίων κ.α. Σε συνδυασμό με τις παραμέτρους του υλικού, οι παράμετροι δομής μπορούν να ορίσουν το σύστημα ώστε να γίνει η προσομοίωση.

Όσον αφορά τις παραμέτρους προσομοίωσης, το VAMPIRE περιλαμβάνει μια σειρά από ενσωματωμένες παραμέτρους προσομοίωσης των μαγνητικών υλικών ενός συστήματος, όπως η θερμοκρασία Curie, οι βρόχοι υστέρησης κ.α. Επιπλέον παράμετροι που πρέπει να ρυθμιστούν στην προσομοίωση είναι η μέγιστη θερμοκρασία (maximum temperature), η ελάχιστη θερμοκρασία (minimum temperature) και το βήμα αύξησης της θερμοκρασίας (temperature increment).

3.3.1 Αρχείο εισόδου (input file) και εξόδου (output file)

Το λογισμικό VAMPIRE απαιτεί τουλάχιστον δύο αρχεία για να εκτελέσει μια προσομοίωση, το αρχείο εισόδου και το αρχείο του υλικού (material file). Στο αρχείο εισόδου αναφέρονται όλες οι ιδιότητες του συστήματος προσομοίωσης, όπως οι διαστάσεις ή το σχήμα των σωματιδίων καθώς και οι παράμετροι προσομοίωσης και το πρόγραμμα εξόδου. Το αρχείο του υλικού καθορίζει τις ιδιότητες του υλικού που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση και δίνεται συνήθως η επέκταση .mat, π.χ. για το κοβάλτιο το αρχείο μας θα έχει το όνομα Co.mat και συμπεριλαμβάνεται με τον κώδικα που καθορίζει το ελάχιστο σύνολο των παραμέτρων, όπως οι διαστάσεις κ.α.

Η έξοδος του κώδικα περιλαμβάνει ένα κύριο αρχείο εξόδου, το οποίο καταγράφει δεδομένα, όπως η μαγνήτιση, το χρονικό σημείο, την θερμοκρασία κλπ. Η μορφή του αρχείου εξόδου πρέπει να είναι πλήρως προσαρμοσμένη έτσι ώστε η ποσότητα των δεδομένων εξόδου να είναι περιορισμένη σε ότι είναι χρήσιμο.

Τέλος, παρατίθεται ένα δείγμα αρχείου εισόδου και εξόδου περιλαμβάνοντας την πηγή του κώδικα, αλλά και το αρχείο του υλικού για ένα απλό τεστ προσομοίωσης που υπολογίζει την εξάρτηση της θερμοκρασίας από το χρόνο για ένα εδροκεντρομένο σύστημα, ενώ στο σχήμα 3.2 παρατηρούμαι πως ένα αρχείο εισόδου, απεικονίζεται σε ένα παράθυρο του λογισμικού VAMPIRE.

Input

```
# -----
# Vampire input file for Co to test ucf
# -----

# -----
# Creation attributes:
# -----
create: crystal-structure = fcc
dimensions: unit-cell-size-x = 3.524 !A
dimensions: unit-cell-size-y = 3.524 !A
dimensions: unit-cell-size-z = 3.524 !A

# -----
# System Dimension:
# -----
dimensions: system-size-x = 10.0 !nm
dimensions: system-size-y = 10.0 !nm
dimensions: system-size-z = 0.4 !nm

# -----
# Material File:
# -----
material: file = Co.mat
# material: unit-cell-file = Co. ucf

# -----
# Simulation attributes:
# -----
sim: enable-dipole-fields
sim: applied-field-unit-vector = 0,0,1
sim: applied-field-strength = 0.05
sim: temperature = 10.0
sim: time-steps-increment = 10
sim: total-time-steps = 25000000
sim: time-step = 1.0E-10

# -----
# Program and integrator details
# -----
```

```
sim: program = benchmark
sim: integrator = monte-carlo
# sim: integrator = llg-heun
```

```
# -----
# data output
# -----
```

```
confing: atoms
confing: atoms-output-rate = 5000
```

```
output: magnetisation
output: output-rate = 1000
```

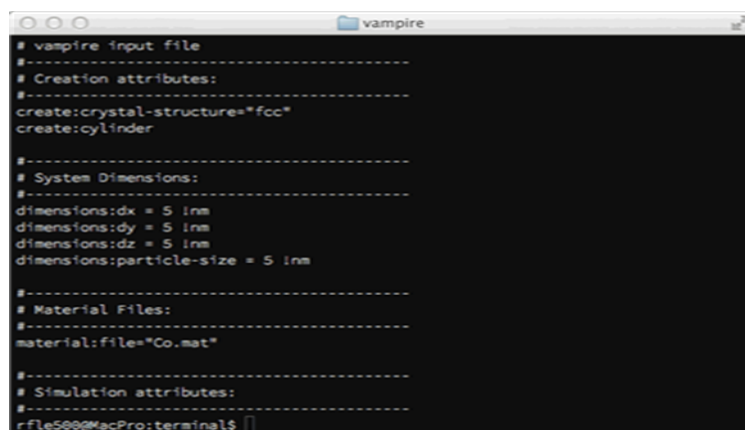
```
screen: magnetisation
```

Co.mat

```
# =====
# Sample Vampire material file V4+
# =====

# -----
# Number of Materials
# -----
material: num-materials = 1

# -----
# Material 1 Cobalt Generic
# -----
material[1]: material-name = "Co"
material[1]: damping-constant = 1.0
material[1]: exchange-matrix[1] = 11.2e-21
material[1]: atomic-spin-moment = 1.72 !muB
material[1]: uniaxial-anisotropy-constant = 1.0e-24
material[1]: material-element = "Co"
material[1]: minimum-height = 0.0
material[1]: maximum-height = 1.0
```



```
# vampire input file
# -----
# Creation attributes:
# -----
create:crystal-structure="fcc"
create:cylinder

# -----
# System Dimensions:
# -----
dimensions:dx = 5 nm
dimensions:dy = 5 nm
dimensions:dz = 5 nm
dimensions:particle-size = 5 nm

# -----
# Material Files:
# -----
material:file="Co.mat"

# -----
# Simulation attributes:
# -----
rfile500@MacPro:terminal$
```

Σχήμα 3.2 Παράδειγμα προσομοίωσης σε παράθυρο VAMPIRE.

Στο δείγμα του αρχείου εισόδου παρατηρούμε τις εντολές που αποτελούν το αρχείο εισόδου και καθορίζουν το σύστημα παραγωγής, τις διαστάσεις του συστήματος, τον έλεγχο προσομοίωσης και τα δεδομένα εξόδου, ενώ στο αρχείο του υλικού παρατηρούμε τις εντολές που καθορίζουν τις ιδιότητες του υλικού, οι οποίες θα αναλυθούν στις παρακάτω ενότητες.

3.3.2 File Format

Το αρχείο εισόδου χωρίζεται σε δύο κύρια μέρη. Το πρώτο μέρος καθορίζει τη μοναδιαία κυψελίδα, τα άτομα στη μοναδιαία κυψελίδα και τις βασικές ιδιότητές τους, όπως η ροπή, η ανισοτροπία, η απόσβεση κ.λπ. Το δεύτερο μέρος περιορίζει όλες τις ατομικές αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής, εντός και ανάμεσα των γειτονικών μοναδιαίων κυψελίδων. Μια γενική μορφή είναι η εξής:

```
1 #Unit cell size:
2 ucx ucy ucx
3 #Unit cell vectors:
4 ucvxx ucvxy ucvxz
5 ucvyx ucvyy ucvyz
6 ucvzx ucvzy ucvzz
7 #Atoms
8 num_atoms_in_unit_cell number_of_materials
9 atom_id cx cy cz [mat_id cat_id hcat_id]
10 ...
11 #Interactions
12 num_interactions [exchange_type]
13 IID i j dxuc dyuc dzuc | Jij
14 | Jx Jy Jz
15 | Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz
16 ...
```

Γενικά, αυτή η μορφή επιτρέπει την προδιαγραφή οποιουδήποτε συστήματος θέλουμε, αλλά τα πολύπλοκα πολυστρωματικά συστήματα απαιτούν μεγάλα μεγέθη αρχείου. Οι των γραμμών του παραπάνω αρχείου είναι:

1 Το '#' ορίζει μια γραμμή σχολίων που αγνοείται από τον αναλυτή. Έτσι οι γραμμές αυτές είναι προαιρετικές.

2 ucx, ucy και ucx είναι το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας σε angstrom.

4-6 Αυτές οι γραμμές ορίζουν το σχήμα της μοναδιαίας κυψελίδας που θα αναπαραχθεί. Για κυβικές κυψελίδες αυτή είναι η μοναδιαία μήτρα.

8 Ορίζει τον αριθμό των ατόμων, τον αριθμό των υλικών και τον τύπο της ανισοτροπίας στη μοναδιαία κυψελίδα. Τα υλικά επιτρέπουν την ομαδοποίηση ατόμων από ένα υλικό και πρέπει να έχουν τις ίδιες παραμέτρους (π.χ. ροπή, απόσβεση κ.λπ.). Η προδιαγραφή του υλικού επηρεάζει τον τρόπο με τον οποίο συλλέγονται και εμφανίζονται τα στατιστικά στοιχεία, και επιτρέπει επίσης την απλή δημιουργία διάταξης κράματος. Ο κατάλογος των ατόμων πρέπει να ακολουθεί αμέσως αυτή τη γραμμή.

9-10 Αυτές οι γραμμές ορίζουν τα άτομα σε κάθε μοναδιαία κυψελίδα και τις παραμέτρους τους:

atom_id Αναγνωριστικός αριθμός ατόμων στη μοναδιαία κυψελίδα, ξεκινώντας από το μηδέν.

cx,cy,cz Είναι οι συντεταγμένες της μοναδιαίας κυψελίδας ως κλάσμα του μεγέθους της μοναδιαίας κυψελίδας.

mat_id Το υλικό id του ατόμου. Ακέραιος αριθμός ξεκινώντας από το μηδέν.

cat_id Κατηγορία του ατόμου που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων που δεν ταξινομούνται από το υλικό, π.χ. ύψος ή υποστρώματα. Ακέραιος αριθμός ξεκινώντας από το μηδέν.

hcat_id Κατηγορία ύψους, που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων ως συνάρτηση του ύψους.

12 Ορίζει τον συνολικό αριθμό αλληλεπιδράσεων για την μοναδιαία κυψελίδα και τον αναμενόμενο τύπο ανταλλαγής (0=ισοτροπικό, 1=διάνυσμα, 2=τανυστής). Αν παραληφθεί, τότε οι αλληλεπιδράσεις λαμβάνονται από τις προδιαγραφές του υλικού στο αρχείο εισόδου. Δεν επιτρέπονται άλλες γραμμές μεταξύ αυτής της γραμμής και της λίστας των αλληλεπιδράσεων.

13 Αυτές οι γραμμές απαριθμούν όλες τις αλληλεπιδράσεις.

IID Το αναγνωριστικό αλληλεπίδρασης IID χρησιμοποιείται μόνο για λογιστικούς σκοπούς και ξεκινά από το μηδέν.

i Ο αριθμός των ατόμων σε τοπική μοναδιαία κυψελίδα.

j Ο αριθμός των ατόμων σε τοπική/απομακρυσμένη μοναδιαία κυψελίδα.

dxuc, dyuc, dzuc Σχετικές ακέραιες συντεταγμένες της μοναδιαίας κυψελίδας για το άτομο j.

Jij, Jxx... Οι τιμές ανταλλαγής (zepto Joules [10^{-21} Joules]), συνήθως με θετικές τιμές ενέργειας. Η θετική ενεργειακή σύμβαση σημαίνει ό,τι η ευθυγράμμιση των ενεργειών είναι αρνητική και οι απωθητικές ενέργειες είναι θετικές. Στην περίπτωση της αρνητικής ανταλλαγής είναι σιδηρομαγνητικά, ενώ στην περίπτωση θετικής ανταλλαγής είναι αντισιδηρομαγνητικά.

Παρακάτω, παρατίθεται ένα παράδειγμα για ένα πλήρες αρχείο δειγμάτων για απλό κυβικό σύστημα με ένα μόνο υλικό.

```
1 #Unit cell size:
2 3.54 3.54 3.54
3 #Unit cell vector:
4 1.0 0.0 0.0
5 0.0 1.0 0.0
6 0.0 0.0 1.0
7 #Atoms num_atoms num_materials; id cx cy cz mat cat hcat
8 1 1
9 0 0.0 0.0 0.0 0.0
10 #Interaction n exctype; id i j dx dy dz Jij
11 6 0
12 0 0 0 1 0 0 -11.2
13 1 0 0 -1 0 0 -11.2
14 2 0 0 0 1 0 -11.2
15 3 0 0 0 -1 0 -11.2
16 4 0 0 0 0 1 -11.2
17 5 0 0 0 0 -1 -11.2
```

Εδώ ορίζεται μόνο ο εύκολος άξονας της ανισοτροπίας και η ισότροπη ανταλλαγή. Δεδομένου ότι υπάρχει μόνο ένα άτομο να μέσα στη μοναδιαία κυψελίδα, όλα τα ζεύγη i-j είναι 0-0, αλλά πάνω απ' τη γειτονική μοναδιαία κυψελίδα είναι ± 1 προς όλες τις κατευθύνσεις. Αυτό γενικά οδηγεί σε μεγάλο αριθμό αλληλεπιδράσεων για τον αυξανόμενο αριθμό ατόμων στη μοναδιαία κυψελίδα.

3.4 Αναφορά εντολών αρχείου εισόδου

Το αρχείο εισόδου μπορεί να δεχθεί ένα μεγάλο αριθμό από εντολές και παρακάτω δίνεται μια λίστα με κάποιες επιλογές και τι αυτές κάνουν. Οι εντολές του αρχείου εισόδου έχουν τη μορφή `category: keyword = value`.

3.4.1 Σύστημα παραγωγής

Οι ακόλουθες εντολές είναι οι εντολές ελέγχου του συστήματος που προσομοιώνεται, συμπεριλαμβανομένων των διαστάσεων, της κρυσταλλικής δομής κ.λπ.

create:full Χρησιμοποιεί ολόκληρο το σύστημα που δημιουργήθηκε χωρίς καμία περικοπή ώστε να σχηματιστεί κάποια μορφολογία σωματιδίου. Η εντολή αυτή θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί κατά την εισαγωγή ενός συστήματος για το οποίο περεταίρω ορισμός του σχήματος δεν είναι απαραίτητος.

create:cube Γίνεται περικοπή ενός κυβοειδούς σωματιδίου με μέγεθος $l_x=l_y=l_z$ που καθορίζεται από το δικτυωτό πλέγμα του κρυστάλλου μέσω της εντολής `create:particle-size`.

create:periodic-boundaries-x Δημιουργεί περιοδικά όρια κατά μήκος της κατεύθυνσης-x.

create:periodic-boundaries-y Δημιουργεί περιοδικά όρια κατά μήκος της κατεύθυνσης-y.

create:periodic-boundaries-z Δημιουργεί περιοδικά όρια κατά μήκος της κατεύθυνσης-z.

3.4.2 Διαστάσεις συστήματος

Οι εντολές που καθορίζουν τις διαστάσεις του συστήματος που δημιουργήθηκε είναι:

dimensions:unit-cell-size=float[0,1+Å, default 3.54Å] Καθορίζει το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας.

dimensions:unit-cell-size-x Ορίζει το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας στον άξονα-x.

dimensions:unit-cell-size-y Ορίζει το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας στον άξονα-y.

dimensions:unit-cell-cize-z Ορίζει το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας στον άξονα-z.

dimensions:system-size Καθορίζει το μέγεθος του συστήματος.

dimensions:system-size-x Καθορίζει το μέγεθος του συστήματος κατά μήκος του άξονα-x.

dimensions:system-size-y Καθορίζει το μέγεθος του συστήματος κατά μήκος του άξονα-y.

dimensions:system-size-z Καθορίζει το μέγεθος του συστήματος κατά μήκος του άξονα-z.

3.4.3 Έλεγχος προσομοίωσης

Οι εντολές που ελέγχουν την προσομοίωση ενός συστήματος, συμπεριλαμβανομένων του προγράμματος της μέγιστης θερμοκρασίας είναι:

sim:integrator=exclusive string Δηλώνει τον ολοκληρωτή που θα χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση. Οι διαθέσιμες επιλογές του ολοκληρωτή είναι:

- 1) llg-heun
- 2) monte-carlo
- 3) llg-midpoint
- 4) constrained-monte-carlo
- 5) hybrid-constrained-monte-carlo

sim:program=benchmark Το πρόγραμμα αυτό ενσωματώνει στο σύστημα 1000 βήματα χρόνου και χρησιμοποιείται για γρήγορες αποδόσεις για διάφορα βήματα.

sim:program=curie-temperature Η προσομοίωση γίνεται με τη χρήση της θερμοκρασίας βρόχου για να προσδιοριστεί η θερμοκρασία Curie του συστήματος. Η θερμοκρασία του συστήματος αυξάνεται σταδιακά, ξεκινώντας από μια ελάχιστη θερμοκρασία, που ορίζεται μέσω της εντολής `sim:minimum-temperature` και σταματάει μέχρι μια μέγιστη θερμοκρασία, που ορίζεται μέσω της εντολής `sim:maximum-temperature`. Ο ρυθμός με τον οποίο αυξάνεται η θερμοκρασία, ορίζεται από την εντολή `sim:temperature-increment`. Σε κάθε θερμοκρασία το σύστημα πρέπει να είναι ισορροπημένο μέσω της εντολής `sim:equilibration-steps` για κάθε βήμα προσομοίωσης, και στη συνέχεια λαμβάνεται ένας στατιστικός μέσος όρος μέσω της εντολής `sim:loop-time-steps`. Η βέλτιστη μέθοδος για τον προσδιορισμό της θερμοκρασίας Curie είναι ο ολοκληρωτής Monte Carlo. Το σύστημα ισορροπείται με μερικές χιλιάδες βήματα. Για να προσδιοριστεί η θερμοκρασία Curie είναι καλύτερο να σχεδιαστεί το μέσο μήκος μαγνήτισης σε κάθε θερμοκρασία, η οποία μπορεί να καθοριστεί χρησιμοποιώντας την εντολή `output:mean-magnetisation-length`. Συνήθως η μαγνήτιση εξαρτάται από τη θερμοκρασία και διατυπώνεται ως εξής:

$$m(t) = \left\langle \sqrt{\sum_i \vec{S}_i} \right\rangle \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta \quad (3.4)$$

όπου, T είναι η θερμοκρασία, T_c η θερμοκρασία Curie και β ο κρίσιμος εκθέτης μαγνήτισης.

sim:enable-dipole-fields Επιτρέπει τον υπολογισμό του πεδίου απομαγνητισμού.

sim:cooling-function Εισάγει την συνάρτηση ψύξης πεδίου. Οι επιλογές είναι `exponential`, `gaussian` και `double-gaussian linear`.

sim:checkpoint Ενεργοποιεί την οριοθέτηση της διαμόρφωσης σπιν στο τέλος της προσομοίωσης `sim:save-checkpoint=end` `sim:save-checkpoint=continuous` όπως και την εντολή `sim:save-checkpoint-rate=1`, `sim:load-checkpoint=restart` όπως επίσης και την εντολή `sim:load-checkpoint=continue`.

3.4.4 Δεδομένα εξόδου

Οι ακόλουθες εντολές ελέγχου είναι δεδομένα εξόδου ενός αρχείου εξόδου. Η σειρά με την οποία εμφανίζονται είναι η σειρά με την οποία εμφανίζονται σ' ένα αρχείο εξόδου. Οι εντολές αυτές είναι:

output:time-steps Είναι ο αριθμός των βημάτων εξόδου (Monte Carlo βήματα) που ολοκληρώθηκαν κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης.

output:real-time Είναι ο χρόνος διαρκείας της προσομοίωσης σε δευτερόλεπτα. Ο πραγματικός χρόνος δίνεται από τον αριθμό των βημάτων του χρόνου πολλαπλασιαζόμενο με τα αποτελέσματα της εντολής `sim:time-steps`. Ο πραγματικός χρόνος δεν έχει κανένα νόημα σε προσομοιώσεις Monte Carlo και δεν υπολογίζεται.

output:temperature Το πρόγραμμα εξάγει στιγμιαία την θερμοκρασία του συστήματος σε βαθμούς Kelvin.

output:magnetisation Το πρόγραμμα εξάγει στιγμιαία τη μαγνήτιση του συστήματος. Τα δεδομένα εξόδου εμφανίζονται σε τέσσερις στήλες, όπου σε κάθε στήλη αντιστοιχούν τα αποτελέσματα $\hat{m}_x$, $\hat{m}_y$, $\hat{m}_z$, $|m|$ δίνοντας την τιμή της μαγνήτισης σε κάθε διεύθυνση του συστήματος, καθώς και το μέτρο διανύσματος της μαγνήτισης. Το ομαλοποιημένο μήκος της μαγνήτισης δίνεται από τη σχέση:

$$|m| = \frac{\sum_i \mu_i S_i}{\sum \mu_i} \quad (3.5)$$

και είναι το άθροισμα όλων των τιμών της μαγνήτισης του συστήματος για κάθε χρονική στιγμή υποθέτοντας ό,τι έχουμε τη σιδηρομαγνητική ευθυγράμμιση όλων των σπιν.

output:magnetisation-length Είναι το μήκος της μαγνήτισης της κανονικοποιημένης μαγνήτισης $|m| = |\sum_i \mu_i S_i| / \sum \mu_i$, όπου η τιμή της ορίζεται από την σιδηρομαγνητική ευθυγράμμιση όλων των σπιν του συστήματος.

output:mean-magnetisation-length Υπολογίζει το μέσο μήκος της μαγνήτισης $\langle |m| \rangle$.

output:output-rate=integer Ελέγχει τον αριθμό των δεδομένων που είναι γραμμένα στο αρχείο εξόδου ή εκτυπώνονται στην οθόνη. Από προεπιλογή το VAMPIRE υπολογίζει τις στατικές κάθε `sim:time-steps-increment` (αύξηση του αριθμού των βημάτων χρόνου). Συνήθως θέλουμε να εξάγουμε το ενημερωμένο στατιστικό στοιχείο (π.χ. μαγνήτιση) κάθε φορά, το οποίο είναι προεπιλεγμένη συμπεριφορά. Ωστόσο, μερικές φορές μπορεί να θέλουμε να σχεδιάσουμε την εξέλιξη του χρόνου ενός μέσου όρου, όπου θέλουμε να συλλέξουμε στοιχεία πιο συχνά από ότι εξάγουμε το αρχείο εξόδου, το οποίο ελέγχεται από αυτή τη λέξη κλειδί. Για παράδειγμα εάν `output:output-rate=10` και `sim:time-steps-increment=10` τότε τα στατιστικά στοιχεία (και οι μέσες τιμές) θα ενημερωθούν μια φορά ανά 10 βήματα, και τα νέα στατιστικά στοιχεία θα αναγράφονται στο αρχείο εξόδου κάθε 100 βήματα χρόνου.

3.4.5 Έξοδος διαμόρφωσης (configuration output)

Αυτές οι επιλογές ενεργοποιούν την έξοδο της διαμόρφωσης σπιν. Κάποιες από τις εντολές της εξόδου διαμόρφωσης είναι:

config:atoms Επιτρέπει την έξοδο της διαμόρφωσης ατομικών σπιν.

config:atoms-output-rate Προσδιορίζει τον αριθμό των αρχείων της διαμόρφωσης που εξάγονται ως πολλαπλάσια του `sim:time-steps-increment`.

3.5 Η μέθοδος Heun

Στα μαθηματικά και στην υπολογιστική επιστήμη, η μέθοδος Heun μπορεί να αναφέρεται στη βελτιωμένη⁸ ή τροποποιημένη μέθοδο Euler (δηλαδή, ο ρητός τραπεζοειδής κανόνας⁹) ή μια παρόμοια μέθοδος Runge-Kutta δύο σταδίων. Η μέθοδος οφείλει το όνομά της στον Karl Heun και είναι μια αριθμητική διαδικασία για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων (ODEs) με μια δεδομένη αρχική τιμή. Και οι δυο παραλλαγές μπορούν να θεωρηθούν ως επεκτάσεις της μεθόδου Euler σε μεθόδους Runge-Kutta 2^{ης} τάξης.

Το VAMPIRE χρησιμοποιεί την αριθμητική Heun για να ενσωματώσει την εξίσωση LLG και να εκτελέσει προσομοιώσεις, χρησιμοποιώντας τον ολοκληρωτή `llg-heun`.

3.6 Αναφορά εντολών του αρχείου του υλικού

Το αρχείο του υλικού ορίζει όλες τις όλες τις μαγνητικές ιδιότητες των υλικών που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση, συμπεριλαμβανομένης της ανταλλαγής, της ανισοτροπίας και της απόσβεσης. Το αρχείο του υλικού ορίζεται από το ευρετήριο ενός αριθμού υλικών ξεκινώντας με ένα από αυτά. Οι ιδιότητες του υλικού στη συνέχεια ορίζονται ως εξής:

material[index]:keyword = value !unit

και ακολουθείται από ένα χαρακτήρα αναφοράς, έτσι ώστε κάθε ιδιότητα να ορίζεται σε ξεχωριστή γραμμή. Το αρχείο του υλικού είναι σε μεγάλο βαθμό σε ελεύθερη μορφή, εκτός από την πρώτη γραμμή που πρέπει να καθορίζεται από τον αριθμό των υλικών για την προσομοίωση. Οι ιδιότητες του υλικού μπορούν να οριστούν σε σειρά ακόμα και αν παραληφθεί η προεπιλεγμένη τιμή που θα χρησιμοποιηθεί. Επίσης, μπορούν να προστεθούν σχόλια χρησιμοποιώντας τον χαρακτήρα `#` (όπως παρατηρείται στο παράδειγμα στην ενότητα 3.3.1), η οποία κινεί το πρόγραμμα ανάλυσης του αρχείου στην επόμενη γραμμή. Μερικές απ' τις εντολές του αρχείου του υλικού είναι:

material:num-materials = int[1-100; default 1] Ορίζει τον αριθμό των υλικών που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση και πρέπει να είναι ενεργοποιημένη στην πρώτη γραμμή του αρχείου. Ο μέγιστος αριθμός των υλικών που μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην προσομοίωση είναι 100. Εάν, χρησιμοποιηθεί μια προσαρμοσμένη μοναδιαία κυψελίδα, στην συνέχεια ο αριθμός των υλικών στα κελιά της μοναδιαίας κυψελίδας, πρέπει να ταιριάζει με τον αριθμό των υλικών, διαφορετικά ο κώδικας θα εμφανίσει σφάλμα.

material:material-name = string[default material #n] Καθορίζει ένα αναγνωριστικό όνομα για το υλικό με μέγιστο μήκος δύο χαρακτήρων. Το αναγνωριστικό όνομα χρησιμοποιείται μόνο στο αρχείο εξόδου και δεν επηρεάζει την λειτουργία του κώδικα.

material:damping-constant = float[0.0-10.0; default] Ορίζει το ποσοστό χαλάρωσης (απόσβεσης) στη δυναμική προσομοίωση, χρησιμοποιώντας την εξίσωση LLG. Για ιδιότητες

ισορροπίας, η απόσβεση πρέπει να οριστεί με τιμή ίση με 1 (κρίσιμη απόσβεση). Για τα περισσότερα υλικά οι τιμές απόσβεσης κυμαίνονται από 0.005 μέχρι 0.1.

material:exchange-matrix[index] = float[default 12×10⁻²¹ J/link] Καθορίζει τα ζεύγη της ενέργειας ανταλλαγής μεταξύ των ατόμων του τύπου δείκτη και γείτονα δείκτη. Τα ζεύγη της ενέργειας ανταλλαγής είναι ανεξάρτητα του αριθμού συντονισμού και έτσι το ολοκλήρωμα ανταλλαγής θα εξαρτηθεί από τον αριθμό των πιο κοντινών γειτόνων για το δικτυωτό πλέγμα του κρυστάλλου. Πρέπει να οριστεί η ενέργεια ανταλλαγής μεταξύ όλων των υλικών της προσομοίωσης. Θετικές τιμές της ενέργειας ανταλλαγής αντιπροσωπεύουν σιδηρομαγνητικές ζεύξεις και αρνητικές τιμές αντιπροσωπεύουν αντισιδηρομαγνητικές ζεύξεις. Για ένα σιδηρομαγνήτη η ενέργεια ανταλλαγής μπορεί να βρεθεί από τη θερμοκρασία Curie μέσω της σχέσης:

$$J_{ij} = \frac{3k_B T_c}{\varepsilon z} \quad (3.6)$$

όπου J_{ij} το ολοκλήρωμα ανταλλαγής, k_B η σταθερά του Boltzmann, T_c η θερμοκρασία Curie, z είναι ο αριθμός των πιο κοντινών γειτόνων και ε είναι ο παράγοντας διόρθωσης των διακυμάνσεων των κυμάτων σπιν σε διαφορετικά κρυσταλλικά πλέγματα.

material:atomic-spin-moment = float[0.01 + μ_B , default 1.72 μ_B] Ορίζει την ατομική μαγνητική ροπή για κάθε ατομική τοποθεσία. Τα ατομικά επίπεδα μπορεί να βρεθούν απ' τις ab-initio προσεγγίσεις ή να προέρχονται από τις μετρήσεις της μαγνήτισης κόρου σε χαμηλές θερμοκρασίες. Η ατομική μαγνητική ροπή σχετίζεται μακροσκοπικά με την μαγνήτιση από τη σχέση:

$$\mu_s = \frac{M_s a^3}{n} \quad (3.7)$$

όπου a είναι η σταθερά του δικτυωτού πλέγματος, n ο αριθμός των ατόμων ανά μονάδα κυττάρου και M_s η μαγνήτιση κόρου. Σε αντίθεση με τις μικρομαγνητικές προσομοιώσεις, στις ατομιστικές προσομοιώσεις χρησιμοποιούνται πάντα θερμοκρασίες 0K από την ατομική ροπή, δεδομένου ότι οι θερμικές διακυμάνσεις της μαγνήτισης προέρχονται από το μοντέλο. Μικρές τιμές (<1 μ_B) θα οδηγήσουν σε προβλήματα για την ολοκλήρωση της εξίσωσης LLG εκτός αν χρησιμοποιούνται χρονικά βήματα.

material:uniaxial-anisotropy-constant = float[default 0.0 J/atom] Ορίζει την δεύτερη τοπική σειρά των ιόντων και την σταθερά της μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας σε κάθε ατομικό χώρο. Η ενέργεια ανισοτροπίας δίνεται από τη σχέση:

$$E_i = -k_2 (\vec{S}_i \cdot \vec{e}_i)^2 \quad (3.8)$$

όπου, $\vec{S}_i$ είναι η κατεύθυνση του τοπικού σπιν και $\vec{e}_i$ είναι το μοναδιαίο διάνυσμα του εύκολου άξονα. Θετικές τιμές του k_2 δίνουν έναν προτιμώμενο προσανατολισμό των σπιν στον εύκολο άξονα, ενώ αρνητικές τιμές του k_2 δίνουν προτιμώμενο προσανατολισμό των σπιν στο εύκολο επίπεδο.

material:material-element = string[default “Fe”] Ορίζει ένα αμιγώς περιγραφικό χημικό στοιχείο, για το υλικό, το οποίο δίνει οπτική αντίθεση σε μια σειρά από προγράμματα, όπως

jmol, rasmol κ.α. Στη δομή rasmol το Fe δηλώνεται με χρυσαφί χρώμα, το H με λευκό χρώμα, το Li με βαθύ κόκκινο, το O με κόκκινο, το B πράσινο και ο Ag γκρίζος. Αυτή η παράμετρος δεν έχει καμιά σχέση με την προσομοίωση, αλλά εμφανίζεται μόνο κατά την έξοδο των ατομικών συντεταγμένων, το οποίο μπορεί να προβληθεί σε rasmol επεξεργασία. Η αντίθεση είναι ιδιαίτερα χρήσιμη στην επιθεώρηση της δημιουργίας δομών, ιδιαίτερα εκείνες με υψηλό βαθμό πολυπλοκότητας.

material:minimum-height = float[0-1:default 0.0] Καθορίζει το ελάχιστο ύψος του υλικού ως κλάσμα του άξονα-z του συνολικού ύψους του συστήματος. Με τον καθορισμό διαφορετικών ελαχίστων και μεγίστου ύψους είναι εύκολο να ορίσουμε ένα πολυστρωματικό σύστημα που αποτελείται από διαφορετικά υλικά. Τα ύψη του υλικού ισχύουν όταν δημιουργείται ο κρύσταλλος και έτσι μπορούν να εφαρμοστούν περεταίρω αλλαγές στη γεωμετρία όπως π.χ. ενός σφαιρικού σχήματος, διατηρώντας παράλληλα την πολυστρωματική δομή. Ο κώδικας θα εμφανίσει επίσης μια προειδοποίηση για ανεπιθύμητες συμπεριφορές.

material:maximum-height = float[0-1:default 1.0] Ορίζει το μέγιστο ύψος του υλικού ως κλάσμα του συνολικού ύψους του συστήματος.

Βιβλιογραφία

- [1] <https://vampire.computing.dundee.ac.uk/>
- [2] Richard F.L., Evans. *Department of Physics*, The university of York, Heslington, York, United Kingdom, YO10 5DD
- [3] Ising E., *Z.Phys.*, **V.31**, p.253, (1925)
- [4] Καρκούλης Δ.Ν., «Κεφάλαιο 1: Το πρότυπο Ising» σελ.8, Διπλωματική Εργασία *Ποροσομοιώσεις Monte Carlo σε GPU*, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, ΕΜΠ, Αθήνα 2010
- [5] Richard F.L., Evans, Biternas A. VAMPIRE User Manual, *Department of Physics*, The University of York, Heslington, UK, YO10 5DD, p.11-12, (2014)
- [6] Παναγιωτόπουλος Ι., «Κεφάλαιο 3: Αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής και μαγνητική τάξη», σελ.30, Βιβλίο *Μαγνητικά υλικά*, Εκδόσεις Α.Γ. Πνευματικός, Αθήνα 2010
- [7] Richard F.L., Evans, Fan W.J., Chureement P., Ostler T.A., Ellis M.O.A., Chantrell R.W. Atomistic spin model simulation of magnetic nanomaterials. *J.Phys.: Condensed Matter* **V.26**, 103202 (2014), p.7
- [8] Süli, Endre, Mayers, David. *An Introduction to Numerical Analysis*, Cambridge University Press, (2003), ISBN 0-521-00794-1
- [9] Ascher, Uri M., Petzold, Linda R. *Computer methods for ordinary differential equations and differential-algebraic equations*, Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, (1998), ISBN 978-0-89871-412-8

Πειραματική μελέτη σε σιδηρομαγνητικά και αντισιδηρομαγνητικά υμένα κοβαλτίου με το λογισμικό VAMPIRE

Στο πρώτο κεφάλαιο αναφερθήκαμε στις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής και πως αυτές παίζουν σημαντικό ρόλο στην εμφάνιση μαγνητικών περιοχών στα μαγνητικά υλικά. Αναφερθήκαμε επίσης, στα είδη μαγνητικής τάξης που οφείλονται στις αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής και ορίσαμε την έννοια των αλληλεπιδράσεων Dzyaloshinskii-Moriya (DMI). Στο δεύτερο κεφάλαιο περιγράψαμε τις τοπολογικές δομές στον μαγνητισμό και αναφερθήκαμε στα σκυρμιόνια και το πως οφείλουν την εμφάνισή τους στις αλληλεπιδράσεις DMI. Στο τρίτο κεφάλαιο περιγράψαμε το λογισμικό VAMPIRE και πως μπορούμε να εκτελέσουμε ατομιστικές προσομοιώσεις με τη χρήση αυτού. Στο παρόν κεφάλαιο θα μελετήσουμε πειραματικά με τη χρήση του λογισμικού VAMPIRE την εμφάνιση μαγνητικών σκυρμιονίων σε σιδηρομαγνητικά και αντισιδηρομαγνητικά υμένα κοβαλτίου. Αρχικά θα ορίσουμε την έννοια του τανυστή ανταλλαγής (tensorial exchange) και της ψύξης πεδίου. Στη συνέχεια θα περιγράψουμε θεωρητικά, πως μπορούμε να δημιουργήσουμε σκυρμιόνια με τη χρήση του λογισμικού VAMPIRE και τέλος θα μελετήσουμε πειραματικά την εμφάνιση μαγνητικών σκυρμιονίων σε υμένα κοβαλτίου.

4.1 Τανυστής ανταλλαγής

Σε ορισμένα υλικά οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής είναι ανισότροπες, δίνοντας έναν προτιμώμενο προσανατολισμό των σπιν. Το VAMPIRE έχει την επιλογή να συμπεριλαμβάνει την πλήρη μορφή του τανυστή ανταλλαγής η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής και Dzyaloshinskii-Moriya.

4.2 Ψύξη πεδίου

Η ψύξη του πεδίου είναι μια άλλη τεχνική που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της θερμοκρασίας αποκλεισμού για ένα υλικό, το οποίο αποτελείται από πολλούς μεμονωμένους μαγνητικούς κόκκους. Η ψύξη του πεδίου είναι ιδιαίτερα χρήσιμη για συστήματα με μεροληπτική μετατόπιση και μαγνητική εγγραφή με υποβοήθηση θερμότητας, καθώς η μαγνητική κατάσταση μετά την ψύξη είναι χαρακτηριστική του συστήματος και της ανισοτροπίας του. Το VAMPIRE περιλαμβάνει ένα πρόγραμμα για την προσομοίωση καμπυλών μαγνητισμού που ψύχονται στο πεδίο για το σύστημά μας, όπου μπορούν να ελεγχθούν εύκολα βασικές παράμετροι, όπως η ισχύς του ισχύοντος πεδίου και ο χρόνος ψύξης.

4.3 Δημιουργία σκυρμιονίων με το VAMPIRE

Τα σκυρμιόνια είναι χειραλικοί νανομαγνήτες. Έχουν υψηλή αντοχή καθώς είναι τοπολογικά προστατευμένα από ένα ρεύμα πολωμένου σπιν.

Για να δημιουργήσουμε το δικό μας αρχείο μοναδιαίας κυψελίδας χρειαζόμαστε την αλληλουχία της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής και της αλληλεπίδρασης DMI¹. Χρειαζόμαστε τις εξής σχέσεις:

$$\mathcal{H}_{exch} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i^a M_{ij}^{ab} \vec{S}_j^b, \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (4.1)$$

και

$$\mathcal{H}_{DM} = \vec{D}_{ij} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) \quad (4.2)$$

Το M_{ij} έχει τιμή:

$$M_{ij} = J_{ij} \vec{I} + M_{ij}^S + M_{ij}^A \quad (4.3)$$

Το J_{ij} δίνεται από:

$$J_{ij} = \frac{1}{3} \text{Tr}(M_{ij}), \quad M_{ij}^S = \frac{M_{ij} + M_{ij}^t}{2} - J_{ij} \vec{I}, \quad M_{ij}^A = \frac{M_{ij} - M_{ij}^t}{2} \quad (4.4)$$

Οι τιμές του D_{ij} δίνονται από:

$$D_{ij}^x = \frac{M_{ij}^{yz} - M_{ij}^{zy}}{2}, \quad D_{ij}^y = \frac{M_{ij}^{zx} - M_{ij}^{xz}}{2}, \quad D_{ij}^z = \frac{M_{ij}^{xy} - M_{ij}^{yx}}{2} \quad (4.5)$$

Και έτσι καταλήγουμε στον τανυστή ανταλλαγής, ο οποίος έχει την εξής μορφή:

$$M_{ij}^A = \begin{bmatrix} 0 & D_{ij}^z & -D_{ij}^y \\ -D_{ij}^z & 0 & D_{ij}^x \\ D_{ij}^y & -D_{ij}^x & 0 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

Για να δημιουργήσουμε τα δικά μας σκυρμιόνια με το λογισμικό VAMPIRE, ξεκινάμε αρχικά από τη μοναδιαία κυψελίδα ενός ατόμου. Αντιγράφουμε το σύστημα για να δημιουργήσουμε την υπερ-κυψελίδα. Έπειτα, υπολογίζουμε τους πλησιέστερους γείτονες. Τέλος, γράφουμε τον κώδικα όσο το δυνατόν πιο γενικά. Αυτό είναι το πρώτο βήμα, που είναι η δημιουργία συστήματος. Το δεύτερο βήμα είναι ο υπολογισμός του διανύσματος DMI. Παρακάτω δίνεται ένα παράδειγμα, για ένα απλό κυβικό σύστημα:

```
# Unit cell size:
3.54 3.54 3.54
# Unit cell vectors:
1.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0
0.0 0.0 1.0
# Atoms num, id cx cy cz mat lc hc
1
0 0.5 0.5 0.5 0 0 0
# Interactions n exctype, id i j dx dy dz Jij
```

```

6 ....
0 0 0 1 0 0 11.2e-21
1 0 0 -1 0 0 11.2e-21
2 0 0 0 1 0 11.2e-21
3 0 0 0 -1 0 11.2e-21
4 0 0 0 0 1 11.2e-21
5 0 0 0 0 -1 11.2e-21

```

όπου η γραμμή 11 σημαίνει τον τύπο της ανταλλαγής (ισοτροπικός, διανυσματικός, τανυστικός). Οι τιμές 11.2e-21 στις γραμμές 12-18 είναι οι τιμές ανταλλαγής (J/link) και οι στήλες 4-6 στις γραμμές 12-18 είναι η σχετική απόσταση.

Οι παράμετροι που πρέπει να προσέξουμε είναι: 1) επιλέγουμε μικρό T_c για γρηγορότερες προσομοιώσεις, 2) επιλέγουμε την κρίσιμη θερμοκρασία, πριν από την προσθήκη του DMI και 3) προσθέτουμε μια αλληλεπίδραση DMI ίση σε ισχύ με την αλληλεπίδραση ανταλλαγής. Η αλληλεπίδραση πρέπει να μοιάζει με:

```

0 0 0 1 0 0 1.6e-22 0 -1.60e-22 0 1.6e-22 0 -1.60e-22 0 1.6e-22

```

όπου η τιμή -1.60e-22 είναι η τιμή του $-D_y$ και η τιμή 1.60e-22 είναι η τιμή του D_y . Μετά εισάγουμε τα δεδομένα του αρχείου εισόδου, όπως στο παράδειγμα:

```

material:file = co.mat
material:unit-cell-file = "file.ucf"
# -----
# Simulation attributes:
# -----
sim:total-time-steps = 3000000
sim:equilibration-temperature = 30
sim:equilibration-time-steps = 10000
sim:time-steps-increment = 1
sim:time-step = 1e-16
sim:minimum-temperature = 0
sim:maximum-temperature = 30.0
sim:applied-field-strength = 0.0
sim:cooling-time = 100 !ps
sim:cooling-function = gaussian !or linear

# -----
# Program and integrator details
# -----

sim:program = field-cool
sim:integrator = llg-heun

# -----
# data output
# -----
output:output-rate = 10000
output:real-time
output:temperature

```

```
output:mean-magnetisation-length
output:magnetisation-length
output:magnetisation
output:mean-susceptibility
```

```
config:atoms
config:atoms-output-rate = 100000
```

Μετά επιλέγουμε το αρχείο του υλικού:

```
# =====
# Sample vampire material file V3+
# =====

# -----
# Number of Materials
# -----
material:num-materials = 1
# -----
# Material 1 Cobalt Generic
# -----
material[1]:material-name = Co
material[1]:damping-constant = 1.0
material[1]:initial-spin-direction = random
material[1]:atomic-spin-moment = 1.72 !muB
material[1]:uniaxial-anisotropy-constant = 5e-23
```

Τέλος, επιλέγουμε το αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας:

```
#Unit cell size:
2.715 2.715 2.715
# Unit cell vectors:
1 0 0
0 1 0
0 0 1
# Atoms num_atoms, num_materials; id cx cy cz mat cat hcat
1
0 0 0 0 0 1 0
# Interactions n exctype; IID i j dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz:
4 tensorial
0 0 0 1 0 0 1.6e-22 0 -1.60e-22 0 1.62e-22 0 1.60e-22 0 1.6e-22
1 0 0 0 1 0 1.6e-22 0 0 0 1.6e-22 -1.60e-22 0 1.60e-22 1.6e-22
2 0 0 -1 0 0 1.6e-22 0 1.60e-22 0 1.6e-22 0 -1.60e-22 0 1.6e-22
3 0 0 0 -1 0 1.6e-22 0 0 0 1.6e-22 1.60e-22 0 -1.60e-22 1.6e-22
```

4.3.1 Παρατήρηση σκυρμιονίων σε σιδηρομαγνητικά υμένα κοβαλτίου με μεταβαλλόμενο DMI

Στην παρούσα ενότητα θα μελετήσουμε την εμφάνιση σκυρμιονίων σε σιδηρομαγνητικά υμένα κοβαλτίου και το πως η τιμή του J επιδρά στην εμφάνιση μαγνητικών σκυρμιονίων. Θα μελετήσουμε την εμφάνιση σκυρμιονίων για τιμές του J 14×10^{-23} J/link, 12×10^{-23} J/link, 10×10^{-23} J/link, 8×10^{-23} J/link, 6×10^{-23} J/link, 4×10^{-23} J/link, 2×10^{-23} J/link και 0 J/link. Για την εκτέλεση των προσομοιώσεών μας θα χρειαστούμε ένα αρχείο εισόδου, ένα αρχείο του υλικού και ένα αρχείο μοναδιαίας κυψελίδας. Αρχικά εκτελέσαμε την προσομοίωση για το υμένο με $J=14 \times 10^{-23}$ J/link. Το αρχείο εισόδου που χρειαστήκαμε σε αυτήν την περίπτωση είναι το εξής:

Input

```
# -----
# Vampire input file for Co to test ucf
# -----

# -----
# Creation attributes:
# -----

# -----
# System Dimensions:
# -----
dimensions:system-size-x = 11.6 !nm
dimensions:system-size-y = 11.6 !nm
dimensions:system-size-z = 0.1 !nm

# -----
# Material File:
# -----
material:file = Co.mat
material:unit-cell-file = Co.ucf

# -----
# Simulation attributes:
# -----
sim:enable-dipole-fields
sim:total-time-steps = 3000000
sim:equilibration-temperature = 30
sim:equilibration-time-steps = 10000
sim:time-steps-increment = 1
sim:time-step = 1e-16
sim:minimum-temperature = 0
sim:maximum-temperature = 30.0
sim:applied-field-strength = 0.0
sim:cooling-time = 100 !ps
sim:cooling-function = gaussian
```

```
# -----
# Program and integrator details
# -----
sim:program = field-cool
sim:integrator = llg-heun

# -----
# data output
# -----

output:output-rate = 10000
output:real-time
output:temperature
output:magnetisation
output:mean-total-energy
output:gnuplot-array-format

screen:magnetisation
#screen:mean-total-energy

config:atoms
config:atoms-output-rate = 200000
```

Το αρχείο του υλικού που χρησιμοποιήσαμε είναι το εξής:

Co.mat

```
# =====
# Sample vampire material file V3+
# =====

# -----
# Number of Materials
# -----
material:num-materials = 1
# -----
# Material 1 Cobalt Generic
# -----
material[1]:material-name = Co
material[1]:damping-constant = 1.0
material[1]:exchange-matrix[1] = 5.78e-21
material[1]:atomic-spin-moment = 1.72 !muB
material[1]:uniaxial-anisotropy-constant = 1.0e-24
material[1]:material-element = Co
material[1]:minimum-height = 0.0
material[1]:maximum-height = 1.0
```

Τέλος, το αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας που χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση είναι το εξής:

```

Co.ucf
# Unit cell size:
2.715 2.715 2.715
# Unit cell vectors:
1 0 0
0 1 0
0 0 1
# Atoms num_atoms, num_materials; id cx cy cz mat cat hcat:
1
0 0 0 0 0 1 0
# Interactions n extype; IID i j dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz:
4 2
0 0 0 1 0 0 1.6e-22 0 -14e-23 0 1.6e-22 0 14e-23 0 1.6e-22
1 0 0 0 1 0 1.6e-22 0 0 0 1.6e-22 -14e-23 0 14e-23 1.6e-22
2 0 0 -1 0 0 1.6e-22 0 14e-23 0 1.6e-22 0 -14e-23 0 1.6e-22
3 0 0 0 -1 0 1.6e-22 0 0 0 1.6e-22 14e-23 0 -14e-23 1.6e-22
# dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz

```

Απ' το αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας παρατηρούμε και τιμές του J ίσες με -14×10^{-23} J/link. Οι τιμές αυτές αντιστοιχούν στο $-J$.

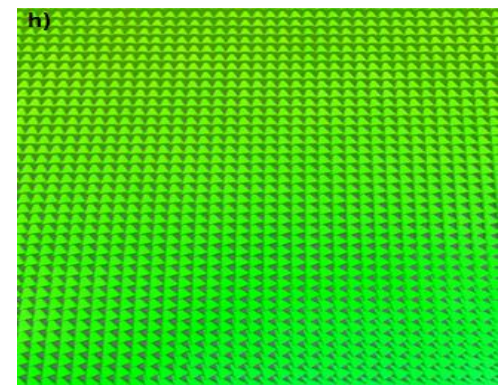
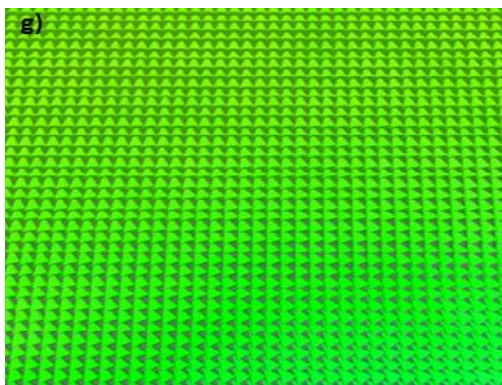
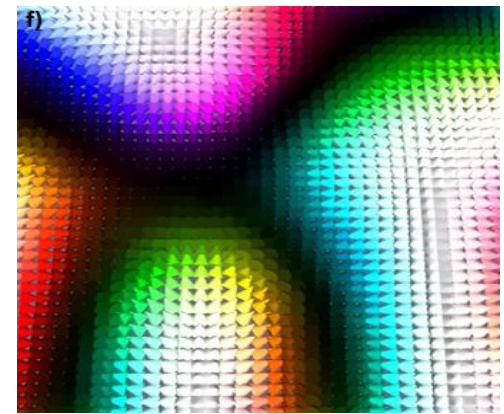
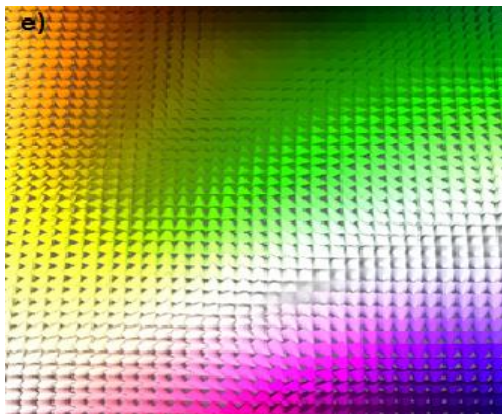
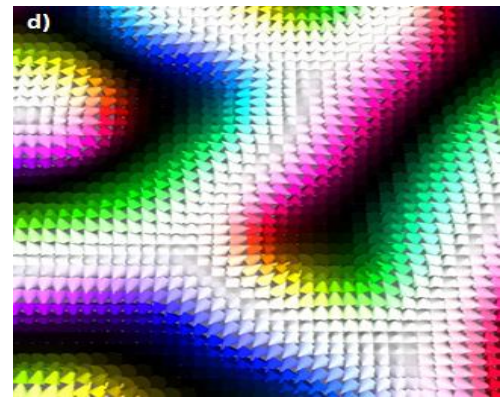
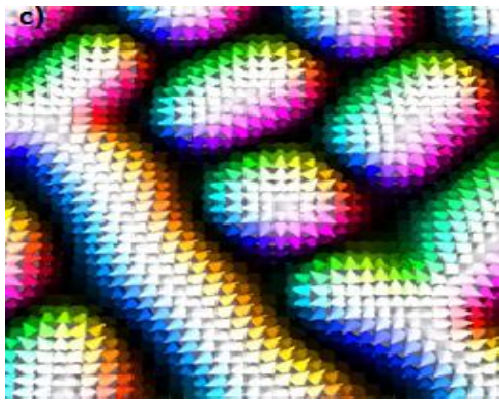
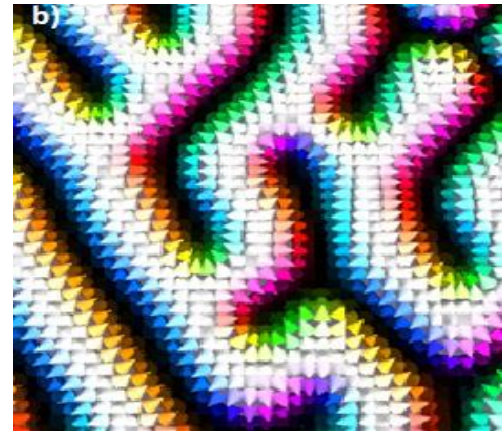
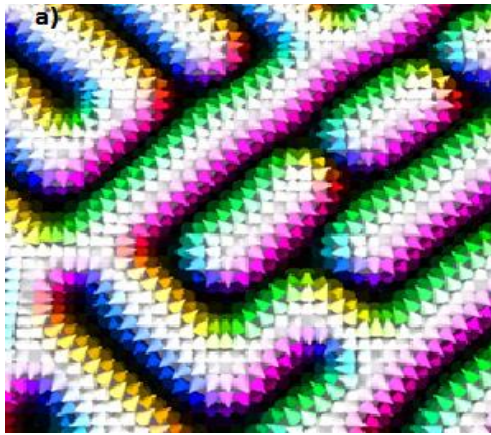
Στη συνέχεια εκτελέσαμε την προσομοίωση για το υμένιο με $J=12 \times 10^{-23}$ J/link. Το αρχείο εισόδου και το αρχείο του υλικού είναι τα ίδια για το υμένιο με $J=14 \times 10^{-23}$ J/link. Το αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας είναι διαφορετικό και είναι το εξής:

```

Co.ucf
# Unit cell size:
2.715 2.715 2.715
# Unit cell vectors:
1 0 0
0 1 0
0 0 1
# Atoms num_atoms, num_materials; id cx cy cz mat cat hcat:
1
0 0 0 0 0 1 0
# Interactions n extype; IID i j dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz:
4 2
0 0 0 1 0 0 1.6e-22 0 -12e-23 0 1.6e-22 0 12e-23 0 1.6e-22
1 0 0 0 1 0 1.6e-22 0 0 0 1.6e-22 -12e-23 0 12e-23 1.6e-22
2 0 0 -1 0 0 1.6e-22 0 12e-23 0 1.6e-22 0 -12e-23 0 1.6e-22
3 0 0 0 -1 0 1.6e-22 0 0 0 1.6e-22 12e-23 0 -12e-23 1.6e-22
# dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz

```

Στο αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας, παρατηρούμε ότι σε κάποιες περιπτώσεις το J λαμβάνει τιμές ίσες με 1.6×10^{-22} J/link. Η τιμές αυτές αντιστοιχούν στα στοιχεία της κυρίας διαγωνίου του τανυστή ανταλλαγής και είναι η τιμή του ολοκληρώματος ανταλλαγής. Οι υπόλοιπες τιμές στα υπόλοιπα στοιχεία του τανυστή ανταλλαγής (εκτός της κυρίας διαγωνίου) αντιστοιχούν στις τιμές της αλληλεπίδρασης DMI. Δηλαδή, σε κάθε προσομοίωση διατηρήσαμε σταθερό το ολοκλήρωμα ανταλλαγής και μειώναμε σταδιακά το DMI και μελετήσαμε την εμφάνιση των μαγνητικών σκυρμιονίων σε κάθε περίπτωση. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης απεικονίζονται στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 4.1 Παρατήρηση σκυρμιονίων σε σιδηρομαγνητικά υμένα κοβαλτίου με μεταβαλλόμενο DMI. Τα σχήματα αντιστοιχούν σε τιμές DMI: a) $J=14 \times 10^{-23}$ J/link, b) $J=12 \times 10^{-23}$ J/link, c) $J=10 \times 10^{-23}$ J/link, d) $J=8 \times 10^{-23}$ J/link, e) $J=6 \times 10^{-23}$ J/link, f) $J=4 \times 10^{-23}$ J/link, g) 2×10^{-23} J/link και h) $J=0$ J/link.

Στο παραπάνω σχήμα παρατηρούμε ότι όσο μειώνεται το DMI, τόσο μειώνεται ο αριθμός των σκυρμιονίων. Όταν το DMI γίνει μηδέν, δεν υπάρχουν πλέον σκυρμιόνια στο δείγμα μας. Αυτό επιβεβαιώνει την θεωρία του 2^{ου} κεφαλαίου, δηλαδή, ότι η ύπαρξη σκυρμιονίων οφείλεται στην αλληλεπίδραση DMI.

Επίσης, όταν το ολοκλήρωμα της αλληλεπίδρασης DMI είναι ίσο με μηδέν, όλα τα στοιχεία του τανυστή ανταλλαγής (εκτός από τα στοιχεία της κυρίας διαγωνίου) είναι μηδέν. Σ' αυτήν την περίπτωση ο τανυστής ανταλλαγής θα έχει την εξής μορφή:

$$M_{ij}^A = \begin{bmatrix} J_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & J_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & J_{zz} \end{bmatrix}$$

όπου, $J_{xx}=J_{yy}=J_{zz}=1.6 \times 10^{-22}$ J/link.

4.3.2 Παρατήρηση σκυρμιονίων σε αντισιδηρομαγνητικά υμένα κοβαλτίου με μεταβαλλόμενο DMI

Στην προηγούμενη ενότητα μελετήσαμε την ύπαρξη των σκυρμιονίων σε σιδηρομαγνητικά υμένα κοβαλτίου και την επίδραση του DMI στην εμφάνιση των σκυρμιονίων. Στην παρούσα ενότητα θα μελετήσουμε την εμφάνιση των σκυρμιονίων σε αντισιδηρομαγνητικά υμένα κοβαλτίου υπό την επίδραση των αλληλεπιδράσεων DMI.

Σ' αυτήν την προσομοίωση χρειαστήκαμε: ένα αρχείο εισόδου, ένα αρχείο του υλικού και ένα αρχείο μοναδιαίας κυψελίδας. Οι τιμές του DMI που χρησιμοποιήσαμε είναι οι ίδιες που χρησιμοποιήσαμε και στα σιδηρομαγνητικά υμένα. Για $J=14 \times 10^{-23}$ J/link χρησιμοποιήσαμε το παρακάτω αρχείο εισόδου:

```

Input
# -----
# Vampire input file for Co to test ucf
# -----

# -----
# Creation attributes:
# -----
create:periodic-boundaries-x
create:periodic-boundaries-y

# -----
# System Dimensions:
# -----
dimensions:system-size-x = 11.6 !nm
dimensions:system-size-y = 11.6 !nm
dimensions:system-size-z = 0.1 !nm

# -----
# Material File:
# -----
material:file = Co.mat
material:unit-cell-file = CoAF.ucf

```

```

# -----
# Simulation attributes:
# -----
sim:enable-dipole-fields
sim:total-time-steps = 3000000
sim:equilibration-temperature = 30
sim:equilibration-time-steps = 10000
sim:time-steps-increment = 1
sim:time-steps = 1e-16
sim:minimum-temperature = 0
sim:maximum-temperature = 30.0
sim:applied-field-strength = 0.0
sim:cooling-time = 100 !ps
sim:cooling-function = gaussian

# -----
# Program and integrator details
# -----
sim:program = field-cool
sim:integrator = llg-heun

# -----
# data output
# -----

output:output-rate = 10000
output:real-time
output:temperature
output:magnetisation
output:mean-total-energy
output:gnuplot-array-format

screen:magnetisation
#screen:mean-total-energy

config:atoms
config:atoms-output-rate = 200000

```

Το αρχείο του υλικού που χρησιμοποιήσαμε, είναι το ίδιο που χρησιμοποιήσαμε και στα σιδηρομαγνητικά υμένα. Το αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας που χρησιμοποιήθηκε είναι το εξής:

```

CoAF.ucf
# Unit cell size:
2.715 2.715 2.715
# Unit cell vectors:
1 0 0
0 1 0
0 0 1

```

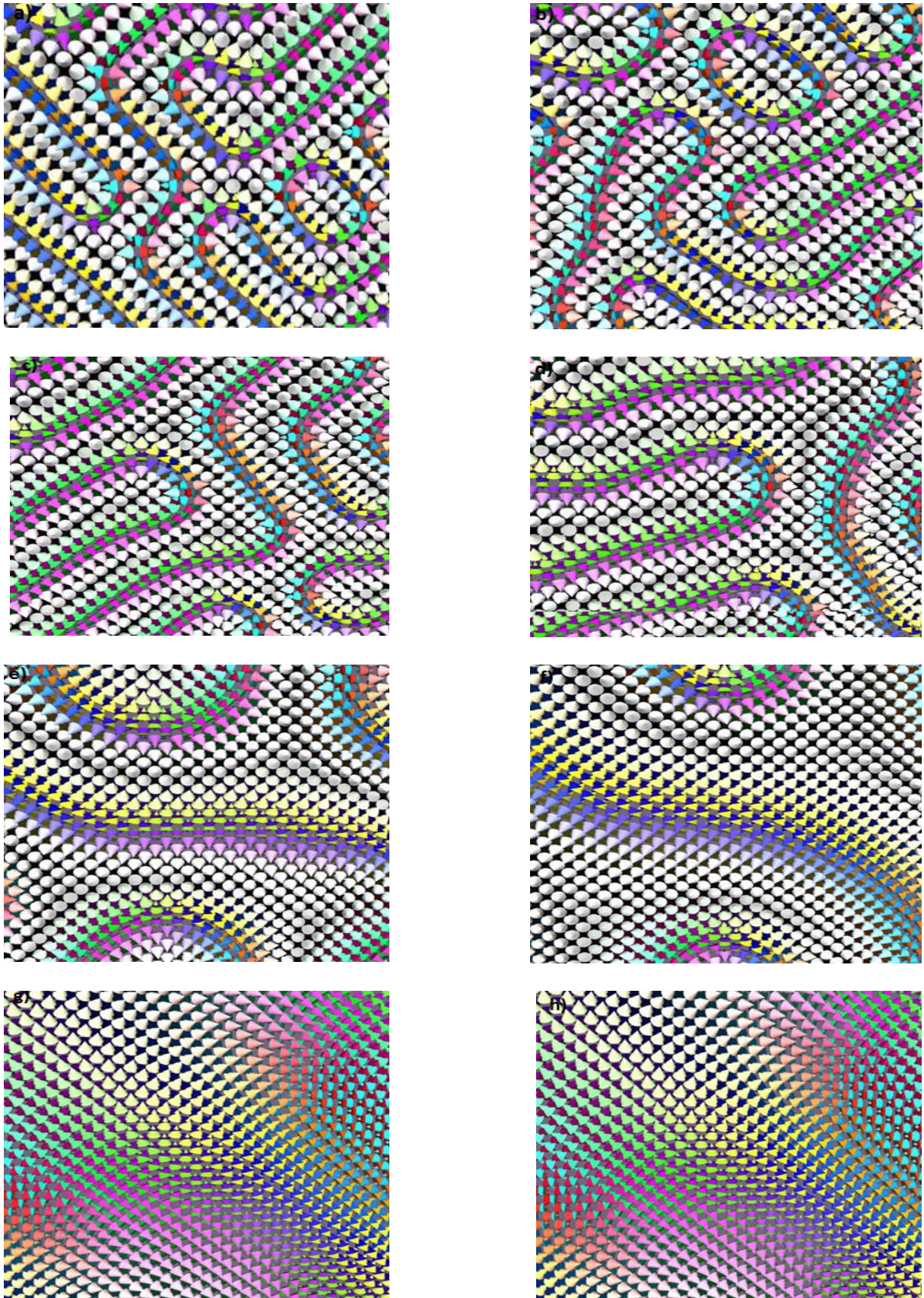
```
# Atoms num_atoms, num_materials; id cx cy cz mat cat hcat:
1
0 0 0 0 0 1 0
# Interactions n exctype; iID i j dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz:
4 2
0 0 0 1 0 0 -1.6e-22 0 -14e-23 0 -1.6e-22 0 14e-23 0 -1.6e-22
1 0 0 0 1 0 -1.6e-22 0 0 0 -1.6e-22 -14e-23 0 14e-23 -1.6e-22
2 0 0 -1 0 0 -1.6e-22 0 14e-23 0 -1.6e-22 0 -14e-23 0 -1.6e-22
3 0 0 0 -1 0 -1.6e-22 0 0 0 -1.6e-22 14e-23 0 -14e-23 -1.6e-22
# dx dx dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz
```

Μετά εκτελέσαμε την προσομοίωση για τιμή του ολοκληρώματος DMI, ίσο με $J=12 \times 10^{-23}$ J/link. Το αρχείο εισόδου και το αρχείο του υλικού που χρησιμοποιήσαμε είναι τα ίδια που χρησιμοποιήσαμε και στην παραπάνω περίπτωση, για $J=14 \times 10^{-23}$ J/link. Το αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας που χρησιμοποιήσαμε για $J=12 \times 10^{-23}$ είναι το εξής:

CoAF.ucf

```
# Unit cell size:
2.715 2.715 2.715
# Unit cell vectors:
1 0 0
0 1 0
0 0 1
# Atoms num_atoms, num_materials; id cx cy cz mat cat hcat:
1
0 0 0 0 0 1 0
# Interactions n exctype; IID i j dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz:
4 2
0 0 0 1 0 0 -1.6e-22 0 -12e-23 0 -1.6e-22 0 12e-23 0 -1.6e-22
1 0 0 0 1 0 -1.6e-22 0 0 0 -1.6e-22 -12e-23 0 12e-23 -1.6e-22
2 0 0 -1 0 0 -1.6e-22 0 12e-23 0 -1.6e-22 0 -12e-23 0 -1.6e-22
3 0 0 0 -1 0 -1.6e-22 0 0 0 -1.6e-22 12e-23 0 -12e-23 -1.6e-22
# dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz
```

Στη συνέχεια εκτελέσαμε τις προσομοιώσεις για $J=10 \times 10^{-23}$ J/link, για $J=8 \times 10^{-23}$ J/link, για $J=6 \times 10^{-23}$ J/link, $J=4 \times 10^{-23}$ J/link, $J=2 \times 10^{-23}$ J/link και $J=0$ J/link. Σε όλες αυτές τις περιπτώσεις χρησιμοποιήσαμε το ίδιο αρχείο εισόδου και αρχείο του υλικού. Αλλάξαμε όμως το αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας σε κάθε περίπτωση. Αυτό που κάναμε είναι ότι αλλάξαμε τις τιμές του ολοκληρώματος DMI όπως φαίνεται στο αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας για $J=12 \times 10^{-23}$ J/link. Η τιμή του ολοκληρώματος ανταλλαγής που χρησιμοποιήσαμε σε όλες τις περιπτώσεις ήταν ίσο με -1.6×10^{-22} J/link. Στα αντισιδηρομαγνητικά υμένια το ολοκλήρωμα ανταλλαγής είχε αρνητική τιμή σε αντίθεση με τα σιδηρομαγνητικά υμένια που είχε θετική τιμή. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι όταν το ολοκλήρωμα ανταλλαγής είναι μεγαλύτερο του μηδενός, τότε το υλικό είναι σιδηρομαγνητικό, ενώ όταν το ολοκλήρωμα ανταλλαγής είναι μικρότερο του μηδενός το υλικό είναι αντισιδηρομαγνητικό, κάτι το οποίο το αναφέραμε και στο πρώτο κεφάλαιο της παρούσας μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας. Μετά την εκτέλεση των προσομοιώσεων μπορούμε να παρατηρήσουμε την εμφάνιση των σκυρμιονίων στα αντισιδηρομαγνητικά υμένια κοβαλτίου, τα οποία απεικονίζονται στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 4.2 Παρατήρηση σκυρμιονίων σε αντισιδηρομαγνητικά υμένια κοβαλτίου με μεταβαλλόμενο DMI. Οι εικόνες αντιστοιχούν σε τιμές για a) $J=14 \times 10^{-23}$ J/link, b) $J=12 \times 10^{-23}$ J/link, c) $J=10 \times 10^{-23}$ J/link, d) $J=8 \times 10^{-23}$ J/link, e) $J=6 \times 10^{-23}$ J/link, f) $J=4 \times 10^{-23}$ J/link, g) $J=2 \times 10^{-23}$ J/link και h) $J=0$ J/link.

Στο παραπάνω σχήμα παρατηρούμε ότι όσο μειώνεται η τιμή του διανύσματος DMI, τόσο μειώνεται ο αριθμός των σκυρμιονίων στο δείγμα μας. Επίσης, παρατηρούμε ότι όταν το διάνυσμα DMI φτάσει την τιμή μηδέν, τότε τα σκυρμιόνια εξουδετερώνονται από το δείγμα μας. Αυτό επιβεβαιώνει την θεωρία που αναλύσαμε στο δεύτερο κεφάλαιο, ότι τα σκυρμιόνια οφείλουν την ύπαρξή τους στις αλληλεπιδράσεις DMI.

4.3.3 Παρατήρηση σκυρμιονίων σε μεγαλύτερα δείγματα κοβαλτίου

Στα προηγούμενα πειράματα μελετήσαμε την ύπαρξη σκυρμιονίων σε σιδηρομαγνητικά και αντισιδηρομαγνητικά υμένια κοβαλτίου με διαστάσεις $11.6 \times 11.6 \times 0.1 \text{ nm}$, μεταβάλλοντας διαρκώς το DMI. Σε αυτό το πείραμα θα μελετήσουμε την ύπαρξη σκυρμιονίων σε σιδηρομαγνητικά και αντισιδηρομαγνητικά υμένια κοβαλτίου με διαστάσεις $34.8 \times 34.8 \times 0.1 \text{ nm}$ και σταθερό DMI ίσο με $12 \times 10^{-23} \text{ J/link}$. Το αρχείο εισόδου που χρησιμοποιήσαμε για το αντισιδηρομαγνητικό υμένιο είναι:

Input

```
# -----
# Vampire input file for Co to test ucf
# -----

# -----
# Creation attributes:
# -----
create:periodic-boundaries-x
create:periodic-boundaries-y

# -----
# System Dimensions:
# -----
dimension:system-size-x = 34.8 !nm
dimension:system-size-y = 34.8 !nm
dimension:system-size-z = 0.1 !nm

# -----
# Material File:
# -----
material:file = Co.mat
material:unit-cell-file = CoAF.ucf

# -----
# Simulation attributes:
# -----
sim:enable-dipole-fields
sim:total-time-steps = 3000000
sim:equilibration-temperature = 30
sim:equilibration-time-steps = 10000
sim:time-steps-increment = 1
sim:time-step = 1e-16
sim:minimum-temperature = 0
```

```

sim:maximum-temperature = 30.0
sim:applied-field-strength = 0.0
sim:cooling-time = 100 !ps
sim:cooling-function = gaussian

# -----
# Program and integrator details
# -----
sim:program = field-cool
sim:integrator = llg-heun

# -----
# data output
# -----
output:output-rate = 10000
output:real-time
output:temperature
output:magnetisation
output:mean-total-energy
output:gnuplot-array-format

screen:magnetisation
#screen:mean-total-energy

confug:atoms
config:atoms-output-rate = 200000

```

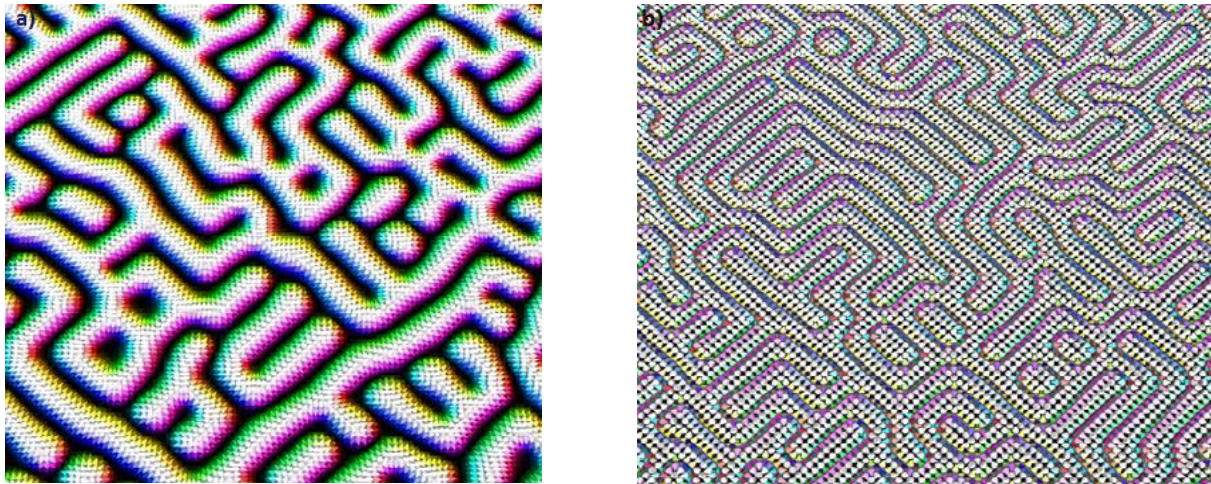
Το αρχείο του υλικού που χρησιμοποιήσαμε είναι το ίδιο που χρησιμοποιήσαμε και στις προηγούμενες προσομοιώσεις, ενώ το αρχείο της μοναδιαίας κυψελίδας που χρησιμοποιήσαμε είναι το εξής:

```

CoAF.ucf
# Unit cell size:
2.715 2.715 2.715
# Unit cell vectors:
1 0 0
0 1 0
0 0 1
# Atoms num_atoms, num_materials; id cx cy cz mat cat hcat:
1
0 0 0 0 0 1 0
# Interactions n exctype; IID i j dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz:
4 2
0 0 0 1 0 0 -1.6e-22 0 -12e-23 0 -1.6e-22 0 12e-23 0 -1.6e-22
1 0 0 0 1 0 -1.6e-22 0 0 0 -1.6e-22 -12e-23 0 12e-23 -1.6e-22
2 0 0 -1 0 0 -1.6e-22 0 12e-23 0 -1.6e-22 0 -12e-23 0 -1.6e-22
3 0 0 0 -1 0 -1.6e-22 0 0 0 -1.6e-22 12e-23 0 -12e-23 -1.6e-22
# dx dy dz Jxx Jxy Jxz Jyx Jyy Jyz Jzx Jzy Jzz

```

Για το σιδηρομαγνητικό υμένιο κοβαλτίου, χρησιμοποιήσαμε το ίδιο αρχείο εισόδου, απλά στην γραμμή 22 αντικαταστήσαμε το material:unit-cell-file=CoAF.ucf με material:unit-cell-file=CoF.ucf, το ίδιο αρχείο του υλικού καθώς και το ίδιο αρχείο μοναδιαίας κυψελίδας. απλά αντικαταστήσαμε την τιμή του ολοκληρώματος ανταλλαγής $J=-12 \times 10^{-22}$ J/link με $J=12 \times 10^{-22}$ J/link. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων απεικονίζονται στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 4.3 Παρατήρηση σκυρμιονίων σε: a) σιδηρομαγνητικό υμένιο κοβαλτίου και b) σε αντισιδηρομαγνητικό υμένιο κοβαλτίου.

Στο παραπάνω σχήμα παρατηρούμε ότι στα υμένια με διαστάσεις $34.8 \times 34.8 \times 0.1 \text{ nm}$ εμφανίζονται περισσότερα σκυρμιόνια σε αντίθεση με τα υμένια με διαστάσεις $11.6 \times 11.6 \times 0.1 \text{ nm}$ των σχημάτων 4.1(b) και 4.2(b) που έχουν την ίδια τιμή του διανύσματος DMI. Από αυτό καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι το μέγεθος των υμενίων παίζει σημαντικό ρόλο στην δημιουργία σκυρμιονίων.

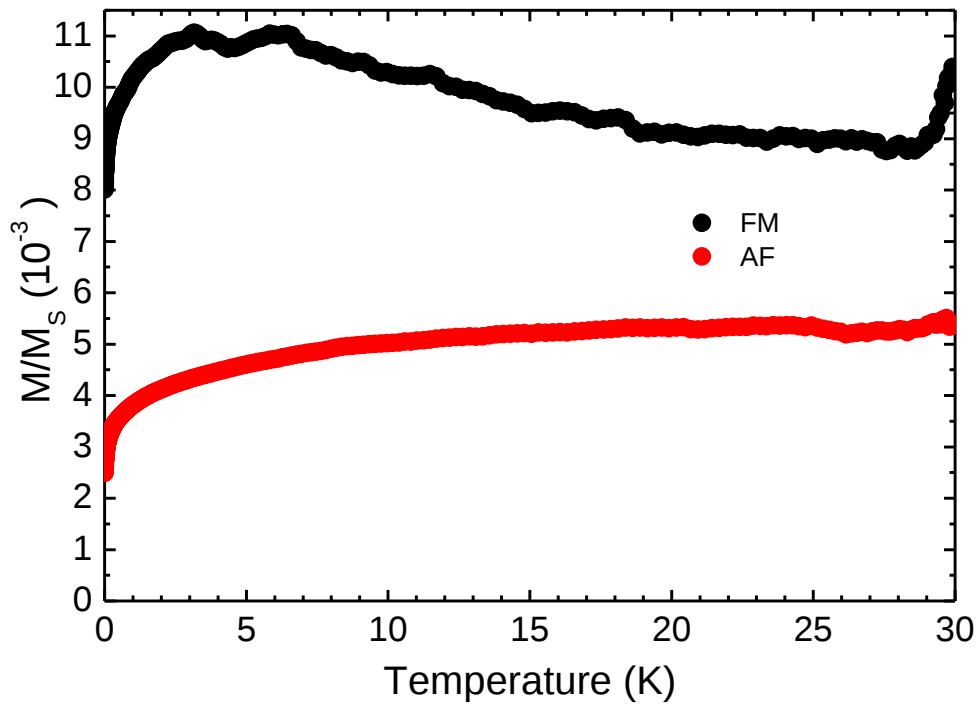
4.4 Ψύξη υπό μηδενικό πεδίο προς την θερμοκρασία $T=0$

Όπως θα παρατήρησε ο προσεκτικός αναγνώστης στις τελευταίες προσομοιώσεις με μεγαλύτερα δείγματα προσομοίωσης που αντιστοιχούν σε σιδηρομαγνητικά και αντισιδηρομαγνητικά μονοστρώματα με διαστάσεις $34.8 \times 34.8 \times 0.1 \text{ nm}$ δεν θέσαμε σταθερή θερμοκρασία αλλά πλησιάσαμε προς την θερμοκρασία $T=0$ ψύχοντας υπό μηδενικό πεδίο. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης για τα δύο είδη μονοστρωματικών υμενίων απεικονίζονται στο σχήμα 4.4.

Στα σιδηρομαγνητικά μονοστρώματα η προσέγγιση στην θερμική ισορροπία είναι αργή και παρατηρείται μια απότομη πτώση στους 30K. Μετά υπάρχει μια θερμική αναμαγνήτιση μέχρι την θερμοκρασία περίπου 4K ακολουθούμενη από πτώση καθώς το σύστημα παγώνει στην τελική κατάσταση (που απεικονίσαμε στο σχήμα 4.3a) στους 0K.

Στα αντισιδηρομαγνητικά μονοστρώματα η προσέγγιση στην θερμική ισορροπία είναι πιο ομαλή και παρατηρείται μια μονότονη πτώση της μαγνήτισης κάτω από τους 2K, καθώς το σύστημα ψύχεται.

Οι θερμοκρασίες αυτές είναι συγκρίσιμες με την τιμή $zJ_{\text{DMI}}/k_B=3.5\text{K}$ που υπολογίζεται εφόσον έχουμε θέσει σαν ισχύ της αλληλεπίδρασης DMI την τιμή $12 \times 10^{-23} \text{ Joule}$ και ο αριθμός των πλησιέστερων γειτόνων είναι $z=4$.



Σχήμα 4.4 Θερμοκρασιακή εξάρτηση της μαγνήτισης κατά την ψύξη από τους 30K προς το απόλυτο μηδέν υπό μηδενικό πεδίο για σιδηρομαγνητικά (FM: μαύρα σημεία) και αντισιδηρομαγνητικά (AF: κόκκινα σημεία) μονοστρωματικά υμένια υπό την επίδραση της αλληλεπίδρασης DMI.

4.5 Συζήτηση αποτελεσμάτων και συμπεράσματα

Με βάση τις ατομιστικές προσομοιώσεις με την χρήση του λογισμικού VAMPIRE μελετήσαμε:

- i) Την αναμενόμενη επίδραση της αλληλεπίδρασης DMI στην δημιουργία σκυρμιονίων σε σιδηρομαγνητικά και αντισιδηρομαγνητικά υμένια κοβαλτίου καθώς και την αναμενόμενη επίδραση του μεγέθους των σωματιδίων στην δημιουργία σκυρμιονίων.
- ii) Την επίδραση της αλληλεπίδρασης DMI στην μεταβολή της μαγνήτισης με την μείωση της θερμοκρασίας και τα αποτελέσματα συμφωνούν με αυτά που αναμέναμε.

Βιβλιογραφία

- [1] Mara Strungaru. Generation skyrmions using VAMPIRE (application to customized .ucf). PDF.