



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ
ΥΛΙΚΩΝ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ
ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΠΡΟΗΓΜΕΝΩΝ ΥΛΙΚΩΝ»

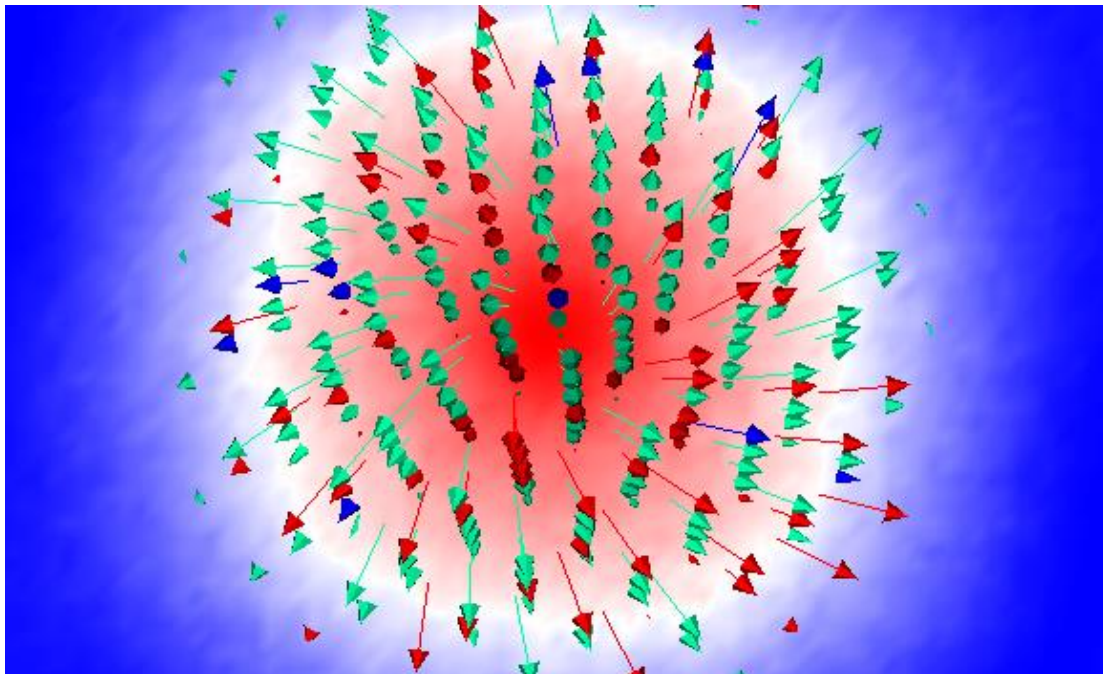


ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του Γεωργιά Χρήστου

με τίτλο:

*Υπολογιστική μοντελοποίηση νανοσωματιδίων CoPd, FeGe, FePt
με μικρομαγνητικές προσομοιώσεις*



Ιωάννινα Φεβρουάριος 2024

Η παρούσα Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία εκπονήθηκε στο πλαίσιο των σπουδών για την απόκτηση του Διπλώματος Μεταπτυχιακών Σπουδών που απονέμει το Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Εγκρίθηκε τηναπό την εξεταστική επιτροπή:

ΟΝΟΜΑΤΕΠΩΝΥΜΟ

ΒΑΘΜΙΑ

..... Επιβλέπων.....

.....π.χ. Καθηγητής

- 1.
- 2.
- 3.

ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ

"Δηλώνω υπεύθυνα ότι η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε κάτω από τους διεθνείς ηθικούς και ακαδημαϊκούς κανόνες δεοντολογίας και προστασίας της πνευματικής ιδιοκτησίας. Σύμφωνα με τους κανόνες αυτούς, δεν έχω προβεί σε ιδιοποίηση ξένου επιστημονικού έργου και έχω πλήρως αναφέρει τις πηγές που χρησιμοποίησα στην εργασία αυτή."

(Υπογραφή υποψηφίου)

Η Διπλωματική αυτή εργασία είναι αφιερωμένη στην μητέρα και στον αδερφό μου για την απaráμιλλη αγάπη και υποστήριξη τους και στην μνήμη του πατέρα μου.



Οι υπολογισμοί της παρούσας μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας πραγματοποιήθηκαν όλοι στο εργαστήριο Multiscale Multidisciplinary Multiphysics Simulation Team (MU3ST) του Τμήματος Επιστήμης των Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων με υπεύθυνο τον αναπληρωτή καθηγητή κ. Λεωνίδα Ν. Γεργίδη.

Περιεχόμενα

	σελ
Περίληψη.....	7
Abstract.....	8
Πρόλογος.....	9
Κατάλογος Εικόνων.....	10
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	14
1.1)Εισαγωγή.....	14
1.2) Μαγνητική ροπή και Μαγνήτιση.....	15
1.3) Κατηγοριοποίηση Μαγνητικών Υλικών.....	17
1.4) Βρόχος Υστέρησης.....	19
1.5) Θερμοκρασία Curie.....	20
1.6) Αντιστροφή της Μαγνήτισης.....	21
1.7) Μαγνητικά Σκυρμιόνια.....	22
1.8) Dzyaloshinskii–Moriya interactions (DMI).....	26
1.9)Εφαρμογές σκυρμιονίων.....	27
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΘΕΩΡΙΑ ΜΙΚΡΟΜΑΓΝΗΤΙΣΜΟΥ.....	31
2.1) Εισαγωγή.....	31
2.2) Μικρομαγνητισμός.....	32
2.3) Ενέργειες του Μικρομαγνητισμού.....	33
2.4) Δυναμική του Μικρομαγνητισμού.....	36
2.5) Χρήση Πεπερασμένων διαφορών ως μέθοδο αριθμητικής επίλυσης.....	39
2.6) Υλικά προς μελέτη.....	42
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΠΟΡΕΙΑ.....	46
3.1) Εισαγωγή.....	46
3.2) Λογισμικά.....	47
3.2.1) Linux.....	47

3.2.2) API Mumax3.....	48
3.2.3) Visit.....	53
3.3) Εκτέλεση προσομοιώσεων για τα επιλεγμένα υλικά.....	57
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	62
4.1) Εισαγωγή.....	62
4.2) FeGe.....	63
4.3) FePt.....	69
4.4)CoPd.....	73
4.5) Σχετικές Μεταβολές των ενεργειών.....	76
4.6) Συνδυαστικά διαγράμματα.....	79
4.6.1) Σχετικές μεταβολές ενεργειών FeGe.....	79
4.6.2) Σχετικές μεταβολές ενεργειών CoPd.....	85
4.6.3) Σχετικές μεταβολές ενεργειών FePt.....	91
4.7) Συμπεράσματα.....	96
Επίλογος.....	98
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	99

Περίληψη

Ο μαγνητισμός αποτελεί ένα κομμάτι της καθημερινότητας του ανθρώπου και γι' αυτό το λόγο έχει μελετηθεί εκτενώς ανά τους αιώνες. Η σημαντικότητα του ξεκινά από την ερμηνεία της ατομικής θεωρίας και χάρη σε αυτήν επεκτείνεται μέχρι και στην άρτια λειτουργία μεγάλων συστημάτων σε τεχνολογικές εφαρμογές. Η μελέτη του μαγνητισμού δεν περιορίζεται στην εφαρμογή εργαστηριακών ελέγχων καθώς μπορούν να συνδυαστούν και με διάφορα χρήσιμα υπολογιστικά συστήματα. Η εισαγωγή της θεωρίας του μικρομαγνητισμού συμβάλλει στην έρευνα της συμπεριφοράς πολλών μαγνητικών υλικών στην κλίμακα νανομέτρων και μικρόμετρων, με την χρήση λογισμικών δρώντας επικουρικά στην πειραματική διαδικασία. Η χρήση αριθμητικών μεθόδων συμβάλλει στην κατανόηση πολύπλοκων μαγνητικών διεργασιών και φαινομένων, συμπεριλαμβανομένων και των μαγνητικών σκυρμιονίων. Με την παρούσα έρευνα στοχεύουμε στη μελέτη της αντιστροφής της μαγνήτισης τριών σιδηρομαγνητικών υλικών με στόχο την ανίχνευση και των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών της δημιουργίας μαγνητικών σκυρμιονίων. Με αυτόν το τρόπο μπορούμε να κατανοήσουμε αν τα εν λόγω υλικά είναι κατάλληλα ως προς την διατήρηση πολύπλοκων μαγνητικών δομών και συνεπώς αν μπορούν να ενσωματωθούν σε νέες τεχνολογίες των αποθηκευτικών μέσων.

Λέξεις-κλειδιά: μικρομαγνητισμός, προσομοιώσεις, σκυρμιόνια, αποθηκευτικά μέσα

Abstract

Magnetism is a part of human daily life, and for this reason, it has been extensively studied throughout the centuries. Its significance begins with the interpretation of atomic theory and, thanks to it, extends to the efficient functioning of large systems in technological applications. The study of magnetism is not limited to the application of laboratory tests but can be combined with various useful computational systems. The introduction of the theory of micromagnetism contributes to the investigation of the behavior of many magnetic materials on the nanoscale and micrometer scale, using software as a complement to the experimental process. The use of numerical methods contributes to the understanding of complex magnetic processes and phenomena, including magnetic hysteresis. With the present research, we aim to study the reversal of magnetization in three ferromagnetic materials with the goal of detecting the specific characteristics of the formation of magnetic hysteresis. In this way, we can understand whether these materials are suitable for preserving complex magnetic structures and, consequently, whether they can be integrated into new technologies for storage media.

Key-words: Micromagnetism, simulations, skyrmions, storage

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Γνωρίζουμε πολύ καλά ότι οι έννοιες επιστήμη και τεχνολογία αποτελούν έννοιες αλληλένδετες, που ανά τους αιώνες η μία συνεισφέρει στην άλλη. Συγκεκριμένα, η επιστήμη αποτελεί το οργανωμένο σύνολο των απαραίτητων γνώσεων που προκύπτουν από αναλυτικές παρατηρήσεις και πειράματα. Από την άλλη η τεχνολογία παρουσιάζεται όταν πρέπει να εφαρμοστούν οι παραπάνω επιστημονικοί νόμοι για διαφορετικούς σκοπούς. Η τάση της ανθρωπότητας να συμβάλει στην εξέλιξη της επιστήμης, οδήγησε σε όλα τα επιστημονικά και τεχνολογικά επιτεύγματα (από την θεραπεία σοβαρών ασθενειών μέχρι και την δημιουργία του παγκόσμιου ιστού) που απολαμβάνουμε κατά τον 21^ο αιώνα. Ο συνδυασμός όλων των τομέων (βιολογία, ηλεκτρομαγνητισμός, μηχανική κλπ) καθόρισε κατά το μεγαλύτερο ποσοστό την δομή κάθε σύγχρονης κοινωνίας.

Μαζί με όλα τα τεχνολογικά επιτεύγματα, δεν θα έπρεπε να αγνοηθεί και η ανάπτυξη των σύγχρονων υπολογιστών. Διάφορα μέρη που συνιστούν το hardware ενός Η/Υ όπως είναι ένας σκληρός δίσκος και η μνήμη RAM, για να λειτουργήσουν άρτια προϋποθέτουν την χρήση των κατάλληλων υλικών που θα επιτελούν τους αντίστοιχους σκοπούς. Για να φτάσουμε μέχρι εδώ, χρειάστηκε η μελέτη πάνω στην πολύπλευρη θεωρία του μαγνητισμού, δηλαδή ποια υλικά επιδεικνύουν καλύτερη μαγνητική συμπεριφορά και μπορούν να εξυπηρετήσουν τις ανάγκες μας. Ένα καλό ερώτημα είναι ποια μεταλλικά υλικά ή κράματα μπορούν να διατηρήσουν την μαγνήτιση τους χωρίς να επηρεάζονται από εξωτερικούς παράγοντες, έτσι ώστε να συμβάλλουν στην αποδοτικότερη αποθήκευση δεδομένων; Η συστηματική έρευνα πάνω στο κομμάτι των μαγνητικών υλικών συνέβαλλε στην εξέλιξη των αποθηκευτικών μέσων και συνεχίζει να συνδράμει στην δυναμική αναβάθμιση τους.

Η πειραματική προσέγγιση της συμπεριφοράς προηγμένων μαγνητικών υλικών μπορεί να ενισχυθεί και με την χρήση υπολογιστικών συστημάτων τα οποία παρέχουν τις κατάλληλες βιβλιογραφικές τιμές. Η θεωρία του μικρομαγνητισμού βοηθάει στην καλύτερη κατανόηση των μαγνητικών φαινομένων και προορίζεται για την τελική χρήση των διαφόρων μαγνητικών υλικών σε χρήσιμες εφαρμογές. Αυτός είναι και ο σκοπός της παρούσας μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας, να συνεισφέρει στην έρευνα της χρήσεως αριθμητικών μεθόδων για την περιγραφή μαγνητικών φαινομένων και την ερμηνεία της συμπεριφοράς διαφόρων υλικών για την άριστη εφαρμογή τους ως αποθηκευτικά μέσα. Επομένως τα κεφάλαια που θα ακολουθήσουν, αναλύουν διεξοδικά τα στοιχεία που κρίνονται απαραίτητα για την πλήρη κατανόηση όλων των παραπάνω θεωριών.

Κατάλογος Εικόνων

- Εικόνα 1: Εμπορικό ενδιαφέρον για τα περισσότερα μαγνητικά υλικά
- Εικόνα 2: Μαγνητική ροπή ενός μεμονωμένου ατόμου, όπου m η μαγνητική ροπή, A το επιφανειακό χωρίο, I το ρεύμα και a το μοναδιαίο διάνυσμα στην διεύθυνση της ροπής.
- Εικόνα 3: Η μαγνήτιση που προκύπτει από τις κατευθύνσεις των μαγνητικών ροπών. Αριστερά το μέσο δεν είναι μαγνητισμένο καθώς οι ροπές είναι τυχαία κατανεμημένες ενώ στην δεξιά οι ροπές είναι προσανατολισμένες προς μια ενιαία κατεύθυνση και παράγουν Μαγνήτιση.
- Εικόνα 4: Ο περιοδικός πίνακας κατηγοριοποιημένος ως προς τις διάφορες ομάδες των υλικών ανάλογα με την μαγνητική συμπεριφορά τους.
- Εικόνα 5: Χαρακτηριστικός Βρόχος υστέρησης ενός σιδηρομαγνητικού υλικού.
- Εικόνα 6: Τρόποι αντιστροφής μαγνήτισης σε ένα υλικό.
- Εικόνα 7: Αναπαράσταση της αντιστροφής της μαγνήτισης κατά μήκος ενός βρόχου υστέρησης.
- Εικόνα 8: Διαφορετικές τοπολογικές δομές: a) Néel Skymion, b) Bloch skymion, c) antiskyrmion, d) biskyrmion, e) vortex, f) meron, g) bimeron, h) skyrmionium, i) skyrmion tube, j) magnetic bobber.
- Εικόνα 9: Διάφοροι αριθμοί περιέλιξης γύρω από ένα συγκεκριμένο σημείο.
- Εικόνα 10: Παραδείγματα κυκλοφορίας (c) και πολικότητας (p) ανάλογα με την φορά και την κατεύθυνση τους.
- Εικόνα 11: Πιθανές διαμορφώσεις spin που σχηματίζουν σκυρμιόνια με διαφορετική τοπολογική μορφή. Το αριστερό χαρακτηρίζεται ως Néel και το δεξί ως Bloch τύπου.
- Εικόνα 12: Παραδείγματα υλικών που εμφανίζουν μαγνητικά σκυρμιόνια.
- Εικόνα 13: Προσομοίωση για την αναπαράσταση της λειτουργίας ενός racetrack με την χρήση σκυρμιονίων.
- Εικόνα 14: Η λειτουργία λογικών πυλών OR και AND με την χρήση σκυρμιονίων σύμφωνα με τον X. Zhang και τους συνεργάτες του.
- Εικόνα 15: Σχηματική αναπαράσταση της φθίνουσας κίνησης που εκτελεί το διάνυσμα της μαγνήτισης γύρω από το διάνυσμα του αποτελεσματικού πεδίου.
- Εικόνα 16: Αναπαράσταση της μοναδιαίας κυψελίδας FeGe. Αριστερά με μπλε και γαλάζιο αποτελούν τα άτομα Ge, ενώ με καφέ και πορτοκαλί τα άτομα Fe. Δεξιά είναι η δομή του κράματος για την κρυσταλλογραφική διεύθυνση [111].
- Εικόνα 17: Η δομή fcc και fct για το κράμα FePt αντίστοιχα.

- Εικόνα 18: Δομή L1o για το κράμα CoPd.
- Εικόνα 19: Έκδοση Ubuntu που χρησιμοποιήθηκε.
- Εικόνα 20: Απεικόνιση ενός τυπικού δοκιμίου που πρέπει να οριστεί για την εκτέλεση μιας προσομοίωσης.
- Εικόνα 21: Το περιβάλλον στο οποίο μπορεί κανείς να τροποποιήσει και να προβάλλει μια μικρομαγνητική προσομοίωση.
- Εικόνα 22: Τυπικό αρχείο .onf. Στην αρχή αναγράφονται όλες οι λεπτομέρειες της εκάστοτε γεωμετρίας (διαστάσεις κελιών κλπ) και παρακάτω δίνεται η μορφή του αρχείου σε binary code.
- Εικόνα 23: Τυπικό αρχείο .vts. Δεδομένου του ότι συμπεριλαμβάνονται όλες οι διευθύνσεις της μαγνήτισης, κάθε τριάδα αριθμών αντιπροσωπεύουν ένα ξεχωριστό κελί
- Εικόνα 24: Παρόμοιο αρχείο vts για την πυκνότητα της ενέργειας ανταλλαγής σε κάθε κελί.
- Εικόνα 25: Κεντρικό παράθυρο στο οποίο γίνεται η εισαγωγή αρχείων και η επεξεργασία της προσομοίωσης.
- Εικόνα 26: Παράθυρο στο οποίο γίνεται η επιλογή των αρχείων που θα καθορίσουν την προσομοίωση.
- Εικόνα 27: Η εφαρμογή pseudocolour και vectors για την απεικόνιση της αντιστροφής της μαγνήτισης αντίστοιχα. Στη περίπτωση του pseudocolour είναι δυνατή η χρήση διάφορων εναλλαγών χρωμάτων και στο vector γίνεται η ρύθμιση του αριθμού και χρώματος των διανυσμάτων.
- Εικόνα 28: Ο συνδυασμός pseudocolour και vectors.
- Εικόνα 29: Αριστερά η πλήρης γεωμετρία και δεξιά μετά την αφαίρεση ενός κύβου στην άνω δεξιά γωνία (corner30x30).
- Εικόνα 30: Αριστερά η γεωμετρία με σχήμα σταυρού(cross30x30), στο μέσο η γεωμετρία c-type50x50 και δεξιά η γεωμετρία με την ατέλεια.
- Εικόνα 31: Ο ολοκληρωμένος κώδικας για την περίπτωση του FeGe για την γεωμετρία του απλού κυβοειδούς. Για τα υπόλοιπα υλικά πρέπει να γίνει η αντικατάσταση των παραμέτρων από τον Πίνακα 1 και για την περίπτωση του CoPd να αλλάξει η διακριτοποίηση και το βήμα δB.
- Εικόνα 32: Ορισμός της γεωμετρίας corner30x30.
- Εικόνα 33: Ορισμός της γεωμετρίας cross30x30.
- Εικόνα 34: Ορισμός της γεωμετρίας ctype50x50.
- Εικόνα 35: Ορισμός της γεωμετρίας με την ατέλεια.
- Εικόνα 36: Εξέλιξη της μαγνήτισης με την μεταβολή του εξωτερικού πεδίου για όλες τις γεωμετρίες του FeGe και αναγραφή του αριθμού Skyrmission σε κάθε βήμα.

- Εικόνα 37: Σχηματική αναπαράσταση της μεταβολής του αριθμού Skyrmission σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο για όλες τις γεωμετρίες του FeGe.
- Εικόνα 38: Εξέλιξη της μαγνήτισης με την μεταβολή του εξωτερικού πεδίου για όλες τις γεωμετρίες του FePt και αναγραφή του αριθμού Skyrmission σε κάθε βήμα.
- Εικόνα 39: Σχηματική αναπαράσταση της μεταβολής του αριθμού Skyrmission σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο για όλες τις γεωμετρίες του FePt.
- Εικόνα 40: Εξέλιξη της μαγνήτισης με την μεταβολή του εξωτερικού πεδίου για όλες τις γεωμετρίες του CoPd και αναγραφή του αριθμού Skyrmission σε κάθε βήμα.
- Εικόνα 41: Σχηματική αναπαράσταση της μεταβολής του αριθμού Skyrmission σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο για όλες τις γεωμετρίες του CoPd..
- Εικόνα 42: Σχετικές μεταβολές των ενεργειών ανισοτροπίας, απομαγνήτισης και ανταλλαγής για τα 3 κράματα κατά τον σχηματισμό σκυρμιονίου.
- Εικόνα 43: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FeGe με την ολόκληρη γεωμετρία.
- Εικόνα 44: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FeGe με την corner γεωμετρία.
- Εικόνα 45: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FeGe με την cross γεωμετρία.
- Εικόνα 46: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FeGe με την c-type γεωμετρία.
- Εικόνα 47: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FeGe με την γεωμετρία της ατέλειας.
- Εικόνα 48: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα CoPd με την ολόκληρη γεωμετρία.
- Εικόνα 49: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα CoPd με την corner γεωμετρία.
- Εικόνα 50: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα CoPd με την cross γεωμετρία.
- Εικόνα 51: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα CoPd με την c-type γεωμετρία.

- Εικόνα 52: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα CoPd με την γεωμετρία με την ατέλεια.
- Εικόνα 53: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FePt με την ολόκληρη γεωμετρία.
- Εικόνα 54: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FePt με την corner γεωμετρία.
- Εικόνα 55: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FePt με την cross γεωμετρία.
- Εικόνα 56: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FePt με την c-type γεωμετρία.
- Εικόνα 57: Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmission S για το κράμα FePt με την defect γεωμετρία.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Εισαγωγή

Διάρθρωση του κεφαλαίου:

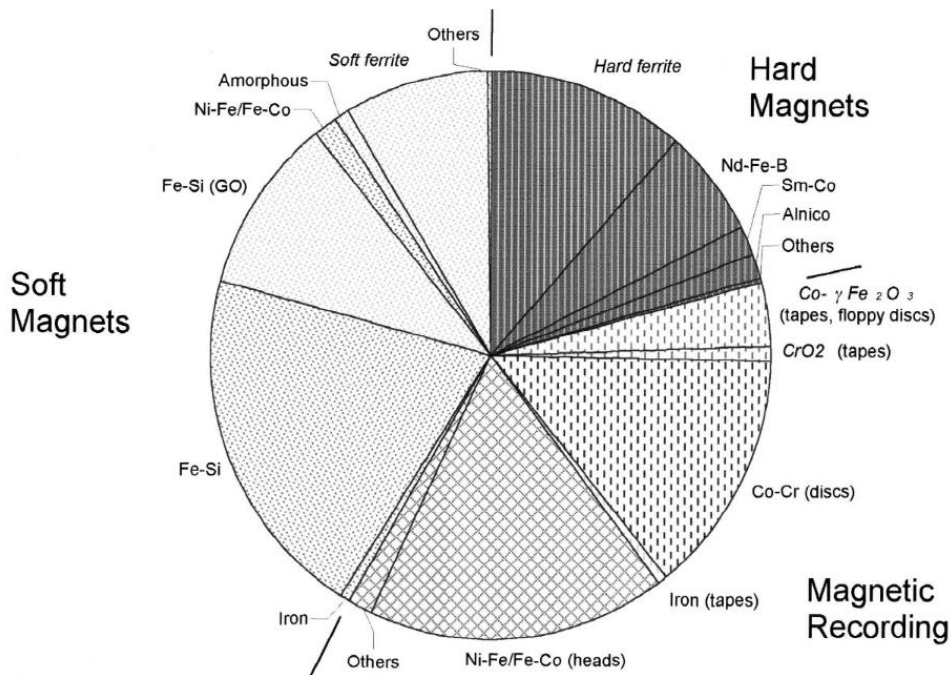
- Εισαγωγή στην ιστορία του Μαγνητισμού και στην εμπορική σημασία του
- Παρουσίαση των σημαντικότερων στοιχείων της θεωρίας του Μαγνητισμού
- Περιγραφή της συμπεριφοράς των μαγνητικών σκυρμιονίων

1.1)Εισαγωγή

Η έννοια του μαγνητισμού αποτέλεσε ένα πεδίο με σταδιακή εξελικτική πορεία καθώς δεν διατυπώθηκε εγκαίρως. Αντιθέτως, από την αρχαιότητα ξεκίνησε να συλλαμβάνεται ως ιδέα από την ανθρωπότητα η οποία πειραματίστηκε έχοντας εργαλείο τις τότε πρώιμες επιστημονικές γνώσεις. Συγκεκριμένα, η ανακάλυψη του ορυκτού Μαγνητίτη πριν από 2500 χρόνια αποτέλεσε το έναυσμα για τη περαιτέρω μελέτη του φαινομένου του μαγνητισμού και τη μετέπειτα πρόοδο του ανθρώπου. Πολλούς αιώνες αργότερα η πρώτη καταγεγραμμένη έρευνα στον μαγνητισμό αποδίδεται στον Άγγλο William Gilbert (1540-1603). Ο εν λόγω επιστήμονας ασχολήθηκε με τον πειραματισμό με μαγνήτες από σίδηρο, την πλήρη περιγραφή του μαγνητικού πεδίου της Γης ενώ προχώρησε και στην δημοσίευση του βιβλίου του που ειδικεύεται στην συμπεριφορά των μαγνητικών υλικών (*On the magnet*). Η συνεισφορά του στη θεμελίωση των βασικών αρχών για την κατανόηση των ιδεών του μαγνητισμού είναι εμφανής. Θα μπορούσε να ειπωθεί ότι χάρις σε αυτόν ξεκίνησε η εκτεταμένη και συστηματική έρευνα πάνω στα μαγνητικά υλικά, τα οποία βρίσκουν ποικίλες εφαρμογές και διευκολύνουν τις ζωές μας μέχρι και σήμερα.

Ο 21^{ος} αιώνας, χαρακτηρίζεται από πολυάριθμα τεχνολογικά και πρωτίστως επιστημονικά επιτεύγματα. Ένα μεγάλο μερίδιο ευθύνης αποδίδεται στην άρτια λειτουργία των μαγνητικών υλικών. Μια μικρή ματιά γύρω μας αρκεί για να αντιληφθούμε την πληθώρα των εφαρμογών που εντοπίζονται τα μαγνητικά υλικά. Οι περισσότερες από αυτές είναι: ηλεκτρομαγνήτες, αισθητήρες, πυρήνες μετασχηματιστών, κεφαλές ανάγνωσης, κεφαλές εγγραφής, συγκεντρωτές ροής, ηλεκτροκινητήρες, ηλεκτρογεννήτριες, αντλίες, μικροκυματικές διατάξεις κλπ. Επί παραδείγματι ένα σύγχρονο αμάξι δεν δύναται να δουλέψει χωρίς μαγνητικά υλικά τα οποία εντοπίζονται στην γεννήτρια, μίζα, ηλεκτρικά παράθυρα, κλείδωμα κλπ. Επιπλέον οι μέθοδοι αποθήκευσης πληροφοριών βασίζονται επί το πλείστον στη χρήση μαγνητικών υλικών.

Οι εφαρμογές αυτές βασίζονται κατά κύριο λόγο στις μαγνητικές ιδιότητες που επιδεικνύει το εκάστοτε υλικό. Ένας καλός τρόπος διάκρισης είναι σε μαλακά και σκληρά μαγνητικά υλικά. Τα πρώτα χρειάζονται ασθενή εξωτερικά πεδία για να παράγουν πολλαπλάσια πεδία με την ιδιοτροπία ότι απομαγνητίζονται εύκολα (αισθητήρες, κεφαλές ανάγνωσης κλπ), ενώ τα σκληρά χαρακτηρίζονται και ως μόνιμοι μαγνήτες και διατηρούν τη μαγνήτισή τους για μεγάλο χρονικό διάστημα (ηλεκτροκινητήρες, συστήματα σκληρών δίσκων κλπ). Όλα αυτά μαζί και ιδιαίτερα τα μέσα μαγνητικής εγγραφής σημειώνουν ραγδαία τεχνολογική ανάπτυξη κάτι το οποίο δικαιολογεί την ετήσια αγορά μαγνητικών υλικών η οποία ξεπερνά τα 30 δις δολάρια. Η παρακάτω εικόνα (εικόνα 1) αποδεικνύει το εμπορικό ενδιαφέρον που εμφανίζουν τα πιο συνηθισμένα μαγνητικά υλικά. Έχοντας κατά νου όλα τα παραπάνω, γίνεται κατανοητό ότι ο μαγνητισμός και η εξέλιξη αποτελούν έννοιες αλληλένδετες. [1]



Εικόνα 3 Εμπορικό ενδιαφέρον για τα περισσότερα μαγνητικά υλικά. [2]

1.2) Μαγνητική ροπή και Μαγνήτιση

Η δομική μονάδα που παίζει καθοριστική σημασία στον μαγνητισμό σχετίζεται με τη στοιχειώδη μαγνητική ροπή (μ). Το σύνολο όλων αυτών καθορίζουν το μαγνητοστατικό πεδίο το οποίο είναι διαφορετικό για κάθε υλικό και επηρεάζεται από τα εξωτερικά μαγνητικά πεδία. Αυτό σημαίνει ότι αν μια μαγνητική ροπή εκτεθεί σε ένα εξωτερικό ομογενές μαγνητικό πεδίο, πραγματοποιείται μια διαδικασία στρέψης, που αποτελείται από διάφορους μηχανισμούς εφησυχασμού. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να παραλληλίζεται με το

πεδίο. Η δυναμική ενέργεια που συνοδεύει το φαινόμενο αυτό δίνεται από τον ακόλουθο τύπο:

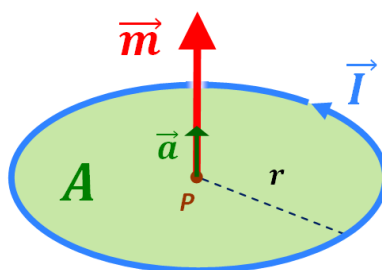
$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (1.1)$$

Παρατηρώντας την συγκεκριμένη εξίσωση (εξίσωση 1.1), το εσωτερικό γινόμενο των δύο διανυσμάτων αποδεικνύει ότι η ενέργεια ελαχιστοποιείται όταν η ροπή και το πεδίο είναι παράλληλα ($\phi=0^\circ$), ενώ είναι μέγιστη όταν είναι αντιπαράλληλα ($\phi=180^\circ$).

Η παρουσία μιας κατανομής ρευμάτων ευθύνεται για τη δημιουργία και τον προσανατολισμό ενός μαγνητικού πεδίου και το αντίστροφο. Αν υποθέσουμε έναν επίπεδο βρόχο ρεύματος, η μαγνητική ροπή θα υπολογιστεί σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση:

$$\boldsymbol{\mu} = I\mathbf{S} \quad (1.2)$$

όπου I είναι η ένταση του ηλεκτρικού ρεύματος και \mathbf{S} είναι το διάνυσμα με μέτρο το εμβαδόν που διαγράφει ο συγκεκριμένος βρόχος. Προεκτείνοντας αυτήν τη διατύπωση σε ατομικές διαστάσεις, ένα άτομο μπορεί να χαρακτηριστεί ως ένας μικροσκοπικός βρόχος ρεύματος με την τροχιακή κίνηση των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα όπως δείχνει η εικόνα 2. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, αθροίζοντας όλες τις ατομικές μαγνητικές ροπές διανυσματικά να λαμβάνουμε την ολική μαγνητική κατάσταση ενός υλικού. [3]



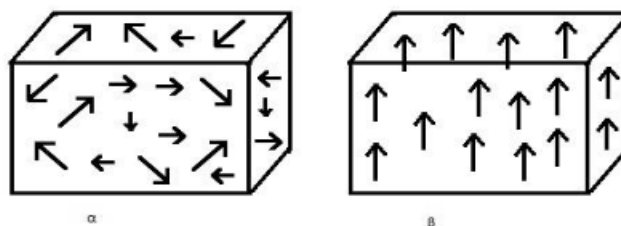
Εικόνα 4 Μαγνητική ροπή ενός μεμονωμένου ατόμου, όπου m η μαγνητική ροπή, A το επιφανειακό χωρίο, I το ρεύμα και a το μοναδιαίο διάνυσμα στην διεύθυνση της ροπής. [4]

Ένα σημαντικό μέγεθος για την κατανόηση της μαγνητικής κατάστασης ενός υλικού είναι η Μαγνήτιση. Ορίζεται ως η μαγνητική ροπή ανά μονάδα όγκου και συγκεκριμένα:

$$\mathbf{M} = \frac{d\boldsymbol{\mu}}{dV} \quad (1.3)$$

Ο συγκεκριμένος όγκος θα πρέπει να είναι στοιχειώδης, δηλαδή να είναι πολύ μικρότερος από τις διαστάσεις του υλικού αυτού κάθε αυτού αλλά ταυτόχρονα να διαθέτει μεγάλο αριθμό ατόμων. Αυτό γίνεται για να μπορεί το υλικό να περιγράφεται ως συνεχές μέσο. Ένα τέτοιο μέσο αποκτά σημαντική μαγνήτιση όταν όλες ή οι περισσότερες μαγνητικές ροπές είναι προσανατολισμένες προς μια κατεύθυνση. Αυτό δεν συμβαίνει όταν υπάρχει τυχαία

κατανομή των ροπών ως προς την κατεύθυνση τους προσφέροντας έτσι μηδενική ή πολύ μικρή μαγνήτιση. [3]



Εικόνα 5 Η μαγνήτιση που προκύπτει από τις κατευθύνσεις των μαγνητικών ροπών. Αριστερά το μέσο δεν είναι μαγνητισμένο καθώς οι ροπές είναι τυχαία κατανεμημένες ενώ στην δεξιά οι ροπές είναι προσανατολισμένες προς μια ενιαία κατεύθυνση και παράγουν Μαγνήτιση. [3]

1.3) Κατηγοριοποίηση Μαγνητικών Υλικών

Ο διαχωρισμός των μαγνητικών υλικών σε διαφορετικές ομάδες ανάλογα με την απόκριση τους, διευκολύνει την επιλογή τους για κάθε εφαρμογή που προορίζονται. Η καλύτερη κατηγοριοποίηση γίνεται σύμφωνα με τη συμπεριφορά τους στο εξωτερικά εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο σε συνδυασμό με την επίδραση της θερμοκρασίας. Η ταυτοποίηση αυτή ενισχύεται περισσότερο με την εισαγωγή 2 αλληλένδετων μεγεθών, τη μαγνητική επιδεκτικότητα (χ) και τη μαγνητική διαπερατότητα (μ). Η πρώτη έννοια συσχετίζει την μαγνήτιση M ενός υλικού με την ένταση του εξωτερικού πεδίου H . Με αυτόν τον τρόπο δείχνει αν το ίδιο υλικό έλκεται ή απωθείται από το μαγνητικό πεδίο και δίνεται από τον τύπο:

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H} \quad (1.4)$$

Η μαγνητική διαπερατότητα συνδέει τη μαγνητική επαγωγή ($\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{M} + \mathbf{H})$) με την αιτία της επαγωγής H ως:

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (1.5)$$

και αντιπροσωπεύει την ικανότητα ενός υλικού να επιτρέπει την διέλευση των μαγνητικών πεδίων από το εσωτερικό του. [5]

Σύμφωνα με τα παραπάνω, οι ομάδες στις οποίες εντάσσονται τα υλικά είναι οι εξής: Διαμαγνητικά, Παραμαγνητικά, Σιδηρομαγνητικά, Αντισιδηρομαγνητικά και Σιδηριμαγνητικά. Η εικόνα 4 παρουσιάζει όλα τα στοιχεία του περιοδικού πίνακα και τις αντίστοιχες ομάδες όπου ανήκουν.

- **Διαμαγνητικά**

Τα υλικά αυτά εμφανίζουν αρνητική και μικρή μαγνητική επιδεκτικότητα. Αυτό σημαίνει ότι αν τοποθετηθούν σε ένα μαγνητικό πεδίο, η μαγνήτιση τους θα έχει

αντίθετη κατεύθυνση και έτσι αναπτύσσεται μια δύναμη πάνω στο σώμα που το ωθεί σε περιοχές με ασθενέστερα πεδία. Τυπικά παραδείγματα είναι ορισμένοι ημιαγωγοί (πχ Si, Ge), πολυμερικά υλικά και ορισμένα μέταλλα (πχ Cu, Ag).

- **Παραμαγνητικά**

Τα παραμαγνητικά υλικά παρουσιάζουν μικρή αλλά θετική μαγνητική επιδεκτικότητα. Ωστόσο, όταν βρίσκονται σε περιοχές χωρίς κάποιο εφαρμοζόμενο πεδίο σε συνδυασμό με τις συγκρούσεις των ατόμων, οι μαγνητικές ροπές είναι τυχαία κατανομημένες. Οι υψηλές θερμοκρασίες ευθύνονται για τις συγκρούσεις των ατόμων. Επομένως, για κάθε υλικό υπάρχει μια κρίσιμη θερμοκρασία όπου αν την υπερβούμε, οι μαγνητικές ροπές έχουν τυχαίες διευθύνσεις λόγω των ταλαντώσεων/κινήσεων των ατόμων. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η Μαγνήτιση να μειώνεται όσο αυξάνεται η θερμοκρασία. Χαρακτηριστικά υλικά είναι το οξυγόνο (υγρή και αέρια μορφή), ισχυροί μαγνήτες σε υψηλές θερμοκρασίες κλπ.

- **Σιδηρομαγνητικά**

Η ξεχωριστή αυτή κατηγορία διαθέτει τις περισσότερες εφαρμογές σε σύγκριση με τις υπόλοιπες ομάδες. Μέταλλα, όπως ο σίδηρος, νικέλιο, κοβάλτιο και διάφορα άλλα κράματα, έχουν μεγάλη παραμένουσα μαγνήτιση ακόμα και όταν απουσιάζει εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Για αυτό το λόγο, η μαγνητική επιδεκτικότητα τους έχει πολύ μεγάλες θετικές τιμές. Ωστόσο αυτή η συμπεριφορά υφίσταται μέχρι μια ορισμένη θερμοκρασία, χαρακτηριστική για κάθε υλικό, όπου αν την υπερβούμε το υλικό χάνει την σιδηρομαγνητική συμπεριφορά του και μετατρέπεται σε παραμαγνητικό.

- **Αντισιδηρομαγνητικά**

Τα υλικά αυτής της κατηγορίας εμφανίζουν μικρή και θετική επιδεκτικότητα και δεν διαθέτουν παραμένουσα μαγνήτιση με την απουσία εφαρμοζόμενου πεδίου. Αυτό συμβαίνει γιατί οι μαγνητικές ροπές των ατόμων έχουν εναλλασσόμενες αντίθετες κατευθύνσεις με αποτέλεσμα η ολική Μαγνήτιση να αναιρείται. Τυπικό παράδειγμα αποτελεί το χρώμιο.

- **Σιδηρίμαγνητικά**

Σε αυτήν την κατηγορία εντάσσονται οι φερρίτες, στερεά που αποτελούνται από διαφορετικά άτομα κλπ, που εμφανίζουν παρόμοια συμπεριφορά με τους σιδηρομαγνήτες κάτω από μια κρίσιμη θερμοκρασία. Η παρουσία διαφορετικών ατόμων έχει ως αποτέλεσμα η μια ομάδα ατόμων να έχει μαγνητικές ροπές

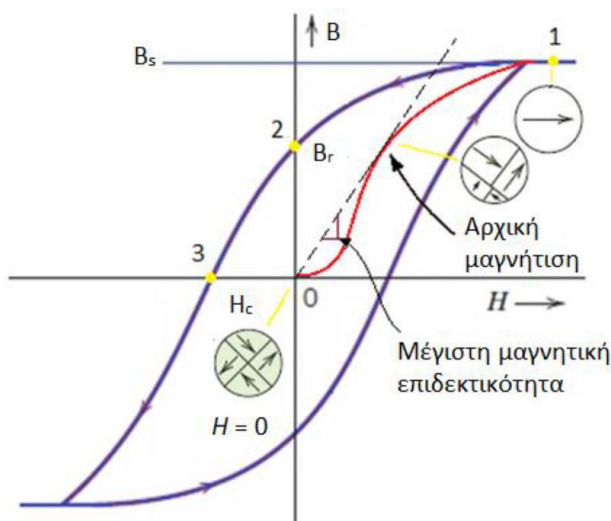
προσανατολισμένες προς μια κατεύθυνση, ενώ η άλλη ομάδα να έχει αντίθετη κατεύθυνση. Ωστόσο δεν έχουν το ίδιο μέτρο, με αποτέλεσμα να μην αναιρείται η συνολική μαγνητική ροπή και το εκάστοτε υλικό να επιδεικνύει μαγνητική συμπεριφορά, ασθενέστερη μεν από τους σιδηρομαγνήτες, αλλά αισθητή. [6]

1												2																																	
H												He																																	
3		4												5		6		7		8		9		10																					
Li		Be												B		C		N		O		F		Ne																					
11		12												13		14		15		16		17		18																					
Na		Mg												Al		Si		P		S		Cl		Ar																					
19		20		21		22		23		24		25		26		27		28		29		30		31		32		33		34		35		36											
K		Ca		Sc		Ti		V		Cr		Mn		Fe		Co		Ni		Cu		Zn		Ga		Ge		As		Se		Br		Kr											
37		38		39		40		41		42		43		44		45		46		47		48		49		50		51		52		53		54											
Rb		Sr		Y		Zr		Nb		Mo		Tc		Ru		Rh		Pd		Ag		Cd		In		Sn		Sb		Te		I		Xe											
55		56		57		72		73		74		75		76		77		78		79		80		81		82		83		84		85		86											
Cs		Ba		La		Hf		Ta		W		Re		Os		Ir		Pt		Au		Hg		Tl		Pb		Bi		Po		At		R											
87		88		89														58		59		60		61		62		63		64		65		66		67		68		69		70		71	
Fr		Ra		Ac														Ce		Pr		Nd		Pm		Sm		Eu		Gd		Tb		Dy		Ho		Er		Tm		Yb		Lu	

Εικόνα 6 Ο περιοδικός πίνακας κατηγοριοποιημένος ως προς τις διάφορες ομάδες των υλικών ανάλογα με την μαγνητική συμπεριφορά τους. [7]

1.4) Βρόχος υστέρησης

Κάθε υλικό ανταποκρίνεται σε εφαρμοσμένα μαγνητικά πεδία με τέτοιο τρόπο που να αναδεικνύει την ταυτότητα και τις ιδιότητες του. Αυτός ο τρόπος απόκρισης μελετάται εκτενώς με τη βοήθεια της παρακολούθησης της μεταβολής της μαγνητικής επαγωγής B σε σχέση με το μαγνητίζον πεδίο H και την δημιουργία ειδικών γραφικών παραστάσεων που ονομάζονται «Βρόχοι Υστέρησης». Πιο αναλυτικά μπορούμε να παρατηρήσουμε τη σχέση με την οποία συνδέονται η Μαγνήτιση (M) με το μαγνητίζον πεδίο (H) ή και μεταξύ της μαγνητικής επαγωγής (B) με το (H). Στην παρακάτω εικόνα παρατίθενται ένας τυπικός βρόχος (B-H):



Εικόνα 5 Χαρακτηριστικός Βρόχος υστέρησης ενός σιδηρομαγνητικού υλικού. [8]

Ο παραπάνω βρόχος (εικόνα 5) μας δείχνει πως μεταβάλλεται η μαγνητική ροή σε ένα σιδηρομαγνητικό υλικό ενώ αυξομειώνεται το επιβαλλόμενο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Εφόσον το συγκεκριμένο σώμα δεν έχει εκτεθεί προηγουμένως σε κάποιο πεδίο ή έχει απομαγνητιστεί, τότε η επαγωγή ακολουθεί τη κόκκινη γραμμή. Όσο αυξάνεται το πεδίο, αυξάνεται και η δύναμη που ασκείται στο σώμα, με αποτέλεσμα να φτάνει σε ένα σημείο κορεσμού (σημείο 1). Σε αυτήν τη θέση, όλες οι μαγνητικές ροπές είναι προσανατολισμένες προς την κατεύθυνση του πεδίου, χαρακτηρίζοντας το σύνολο αυτό ως Μαγνήτιση κόρου (ή και κορεσμού). Η ελάττωση της έντασης του μαγνητικού πεδίου μέχρι και μηδέν οδηγεί τη μαγνητική κατάσταση μέχρι το σημείο 2. Το σημείο αυτό υποδηλώνει την επαγωγή που προκαλείται από την παραμένουσα Μαγνήτιση, η οποία υφίσταται ακόμα και σε μηδενικά μαγνητικά πεδία. Στην συνέχεια, η αντιστροφή του πεδίου οδηγεί στη σταδιακή αντιστροφή των ροπών προς την αντίθετη κατεύθυνση όπου υπάρχει ο αντίστοιχος κορεσμός. Πριν τον κορεσμό υπάρχει ένα ενδιάμεσο στάδιο, όπου η επαγωγή μηδενίζεται στο σημείο 3 και το πεδίο ονομάζεται συνεκτικό. Με τον ίδιο τρόπο, μπορούμε να επανέλθουμε στην αρχική κατάσταση και γι' αυτό μιλάμε για βρόχο. Υλικά που εμφανίζουν στενό βρόχο, διαθέτουν υψηλή μαγνητική διαπερατότητα, χαμηλή παραμένουσα Μαγνήτιση, χαμηλό συνεκτικό πεδίο και υψηλή επιδεκτικότητα και χαρακτηρίζονται ως μαλακά μαγνητικά υλικά (Fe-Si, Ni-Fe/Fe-Co). Αντιθέτως, τα σκληρά μαγνητικά υλικά έχουν πιο πλατύ βρόχο με χαμηλή διαπερατότητα, υψηλή παραμένουσα μαγνήτιση, υψηλό συνεκτικό πεδίο και χαμηλή επιδεκτικότητα (Nd-Fe-B, AlNiCo). [9]

1.5) Θερμοκρασία Curie

Μια πολύ σημαντική παράμετρος, η οποία πρέπει να λαμβάνεται υπόψη για κάθε τεχνολογική εφαρμογή, είναι η θερμοκρασία Curie που διαθέτει κάθε σιδηρομαγνητικό υλικό. Αποτελεί την κρίσιμη θερμοκρασία που αναφέρθηκε στον σιδηρομαγνητισμό, κατά την οποία αν την υπερβούμε με την θέρμανση, διακόπτεται ο παράλληλος προσανατολισμός των μαγνητικών ροπών. Αν επεκταθούμε σε ατομικό επίπεδο, όταν ένα σύστημα βρίσκεται κάτω από αυτήν την κρίσιμη θερμοκρασία, οι μαγνητικές ροπές μπορούν εύκολα να ευθυγραμμιστούν με την παρουσία ακόμα και ενός ασθενούς πεδίου. Όσο όμως αυξάνεται η θερμοκρασία και ξεπερνά την κρίσιμη τιμή, η ενίσχυση των ταλαντώσεων των ατόμων λόγω της προστιθέμενης θερμικής ενέργειας καταστρέφει τη διάταξη αυτή με αποτέλεσμα το υλικό να μην εμφανίζει αυθόρμητη μαγνήτιση και μετατρέπεται σε παραμαγνητικό.[10] Στην κατάσταση αυτή επικρατεί ο νόμος Curie-Weiss (εξίσωση 1.6):

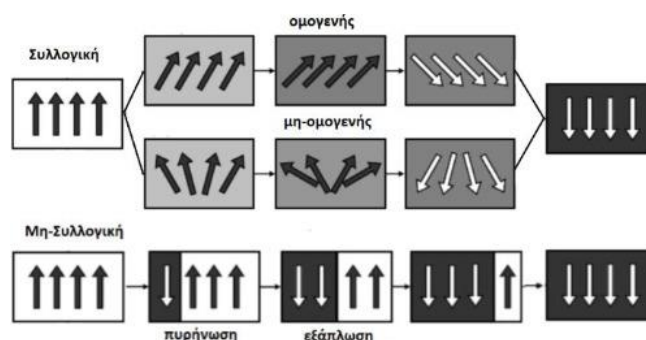
$$\chi = \frac{C}{T-\theta} \quad (1.6)$$

όπου C σταθερά Curie, χ επιδεκτικότητα, ϑ η θερμοκρασία Curie και T η θερμοκρασία που βρίσκεται το σώμα. Σε αντίθεση με την απλούστερη μορφή ($\chi=C/T$), ο εν λόγω τύπος μας δείχνει ότι όταν ξεπερνάμε τη θερμοκρασία Curie που είναι αντιπροσωπευτική για κάθε υλικό, η θερμική ενέργεια υπερισχύει σε βάρος των υπόλοιπων αλληλεπιδράσεων. [3]

1.6) Αντιστροφή της μαγνήτισης

Το παρόν υποκεφάλαιο στοχεύει στην ανάλυση της υστέρησης στα σιδηρομαγνητικά υλικά. Με άλλα λόγια, ακολουθεί η περιγραφή των διαφόρων μηχανισμών με τους οποίους δύναται η αντιστροφή της μαγνήτισης ενός υλικού κατά την επιβολή ενός πεδίου και των ενεργειακών φραγμών που συνδέονται με αυτούς. Όπως θα αποδειχθεί και παρακάτω, το φαινόμενο της υστέρησης οφείλεται στην παρουσία μετασταθών καταστάσεων που μπορούν να σταθεροποιηθούν περισσότερο με την επίδραση της θερμοκρασίας (εφησυχασμός) και με την ύπαρξη μεταβάσεων λόγω του επιβαλλόμενου εξωτερικού πεδίου. Η περιγραφή αυτή παρατηρείται εύκολα και από έναν βρόχο υστέρησης.

Υπάρχουν δύο γενικοί τρόποι με τους οποίους λαμβάνει χώρα η αντιστροφή της μαγνήτισης: συλλογικοί και εντοπισμένοι. Κατά την πρώτη κατηγορία, οι μαγνητικές ροπές αντιστρέφονται ταυτόχρονα σε όλο το υλικό. Σε αυτή την περίπτωση, δεν είναι αναγκαίο να αντιστρέφονται παράλληλα, καθώς υπάρχει το ενδεχόμενο η αντίστροφή να συμβεί και μη-ομογενώς (εικόνα 6). Στον εντοπισμένο (μη-συλλογικό) τρόπο αντιστροφής, πραγματοποιείται από συγκεκριμένα σημεία του υλικού και εξαπλώνεται με κάποιο ρυθμό σε όλη τη μάζα του. Οπότε υπάρχουν 2 στάδια στα οποία εξελίσσεται μια εντοπισμένη αντιστροφή: η πυρήνωση κατά την οποία ξεκινάει το φαινόμενο από συγκεκριμένα σημεία και μετά η εξάπλωση.

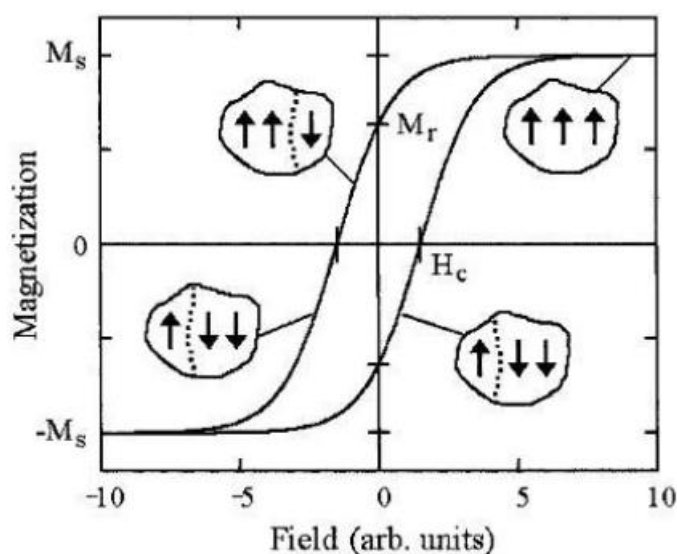


Εικόνα 6 Τρόποι αντιστροφής μαγνήτισης σε ένα υλικό [3]

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η περιγραφή του μηχανισμού αντιστροφής της μαγνήτισης πρέπει να γίνει έχοντας τη βοήθεια ενός βρόχου υστέρησης. Σε ένα ολόκληρο κύκλο μαγνήτισης, οι μηχανισμοί εξαρτώνται από το είδος του υλικού, τη θερμοκρασία, το

σημείο του βρόχου και τον ρυθμό μεταβολής του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Ξεκινώντας από ένα απομαγνητισμένο υλικό, δηλαδή στο σημείο της αρχής των αξόνων, επιβάλλουμε ένα πεδίο έτσι ώστε να φτάσουμε σε θετικό κορεσμό ($+M_s$). Έπειτα, αν μεταβάλλουμε το εξωτερικό πεδίο προς την αντίθετη κατεύθυνση, ξεκινάει η αντιστροφή της μαγνήτισης με την πυρήνωση αντίστροφων περιοχών. Παρατηρούμε ότι στο σημείο της παραμένουσας μαγνήτισης εμφανίζεται μια μικρή περιοχή που έχει διαφορετική κατεύθυνση. Όσο αυξάνεται το πεδίο προς την αντίθετη κατεύθυνση, ενισχύονται οι περιοχές με την εξάπλωση των πυρήνων και καταλήγουμε στον αρνητικό κορεσμό ($-M_s$). Η ίδια διαδικασία συμβαίνει για να μεταβούμε από αυτό το σημείο πάλι στον θετικό κορεσμό. Στην εικόνα 7, δείχνεται παραστατικά ολόκληρος ο μηχανισμός της αντιστροφής της μαγνήτισης σε έναν βρόχο υστέρησης.

Το φαινόμενο της αντιστροφής της μαγνήτισης σε ένα υλικό παρέχει πληροφορίες για τις μαγνητικές ιδιότητες και τις δυνατότητες του, ανάλογα με την εφαρμογή που προορίζεται. Παρακάτω θα ακολουθήσει η ερμηνεία της φύσης και της σημαντικότητας των σκυρμιονίων, τα οποία μπορούν να σχηματιστούν χάρη στη δυνατότητα των μαγνητικών ροπών να αντιστρέφονται με τη βοήθεια διαφόρων ενεργειακών όρων. [3]



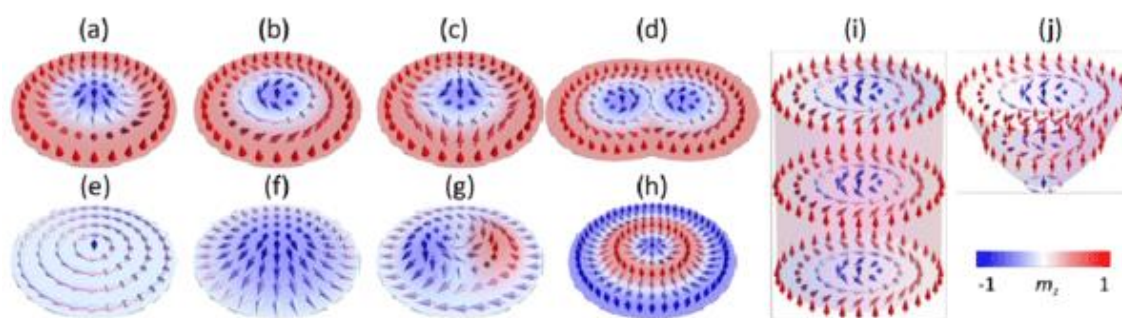
Εικόνα 7 Αναπαράσταση της αντιστροφής της μαγνήτισης κατά μήκος ενός βρόχου υστέρησης. [11]

1.7) Μαγνητικά Σκυρμιόνια

Ο μαγνητισμός και η σπιντρονική αποτελούν ένα ενεργό πεδίο μέσα στο οποίο μπορεί να εφαρμοστεί αναμφίβολα η έννοια της τοπολογίας. Η επεξήγηση της φυσικής πίσω από την παρουσία ορισμένων μαγνητικών υφών (τα λεγόμενα μαγνητικά σολιτόνια), όπως είναι τα σκυρμιόνια και γενικότερα υφές όπου τα μεμονωμένα spin σχηματίζουν δίνες,

εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από τα τοπολογικά χαρακτηριστικά της υφής αυτής κάθε αυτής. Οι δομές αυτές μπορεί να περιορίζονται σε μία διάσταση ή να έχουν περισσότερους βαθμούς ελευθερίας σε δύο ή τρεις διαστάσεις και μπορούν να περιγραφούν από έναν ακέραιο ή ημιακέραιο αριθμό, που συνδέεται με το τοπολογικό φορτίο και σχετίζεται άμεσα με την συμπεριφορά που έχει η συγκεκριμένη δομή.

Παραμένοντας στην περίπτωση του μαγνητισμού και της σπιντρονικής, μεγάλη βαρύτητα έχει δοθεί στη μελέτη των τοπολογικών χαρακτηριστικών σε δομές που συναντώνται σε 2-D μαγνητικά λεπτά υμένα και multilayers. Αυτό συμβαίνει για ποικίλους λόγους αλλά ο κυριότερος είναι διότι τα υμένα έχουν κατανοηθεί σε μεγάλο βαθμό και μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε πολλές εφαρμογές της σπιντρονικής. Η παρακάτω εικόνα (εικόνα 8) επιδεικνύει διάφορες μορφές που συναντώνται σε 2-D ή ψευδό 2-D μαγνητικά υλικά, όπου η δεύτερη κατηγορία δηλώνει ότι η μεταβολή της κατάστασης των spin μπορεί να αγνοηθεί στη διεύθυνση του πάχους του υλικού. [12]

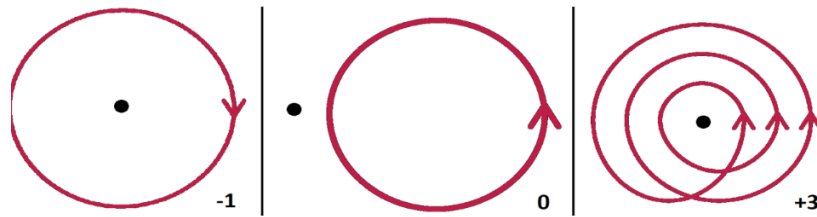


Εικόνα 8 Διαφορετικές τοπολογικές δομές: a) Néel Skyrmion, b) Bloch skyrmion, c) antiskyrmion, d) biskyrmion, e) vortex, f) meron, g) bimeron, h) skyrmionium, i) skyrmion tube, j) magnetic bobber [13]

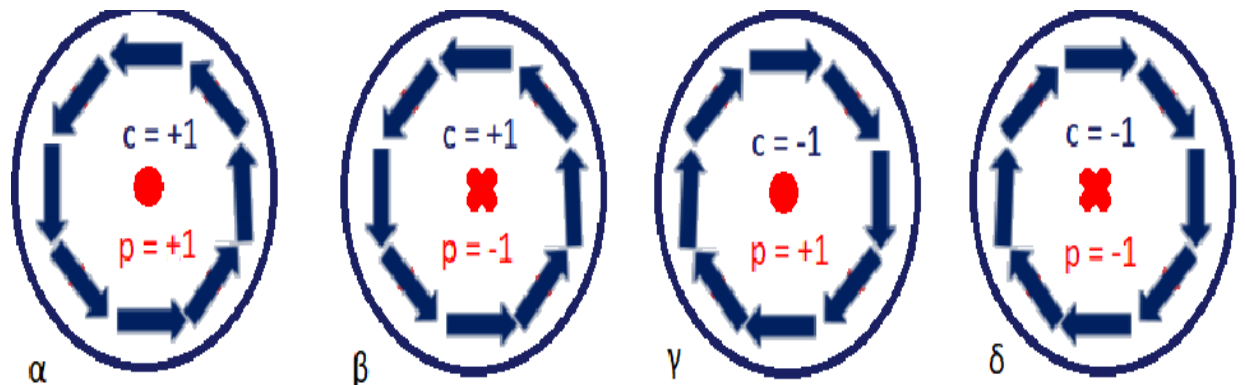
Το πεδίο μελέτης της τοπολογίας διαθέτει έναν πολύ σημαντικό αριθμό συνδεδεμένο με το τοπολογικό φορτίο, τον αριθμό περιέλιξης (winding number) ή αριθμό Skyrmion. Ο αριθμός περιέλιξης ή ο δείκτης περιέλιξης μιας κλειστής καμπύλης στο επίπεδο γύρω από ένα δεδομένο σημείο είναι ένας ακέραιος αριθμός που αντιπροσωπεύει τον συνολικό αριθμό των φορών που η καμπύλη ταξιδεύει αριστερόστροφα γύρω από το σημείο. Η φορά και ο προσανατολισμός της καμπύλης καθορίζουν το πρόσημο του αριθμού περιέλιξης. Μπορεί να θεωρηθεί θετικός όταν η καμπύλη κινείται αριστερόστροφα γύρω από ένα καθορισμένο σημείο (counterclockwise) και αντιθέτως αρνητικός όταν κινείται δεξιόστροφα (clockwise). Επιπλέον, καθορίζεται και το πρόσημο του πυρήνα της καμπύλης σύμφωνα με την κατεύθυνση του και ονομάζεται πολικότητα. [14] Ο αριθμός περιέλιξης ή τοπολογικός αριθμός σκύρμιον (S) χρησιμοποιείται και στην περίπτωση των μαγνητικών σκυρμιονίων και ορίζεται με την ακόλουθη εξίσωση (εξίσωση 1.7):

$$S = \frac{1}{4\pi} \iint_A \mathbf{m} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial y} \right) dx dy, \quad (1.7)$$

όπου \mathbf{m} ($\mathbf{m}=\mathbf{M}/M_s$) είναι το μοναδιαίο διάνυσμα της μαγνήτισης και A το επιφανειακό χωρίο ολοκλήρωσης πάνω στην επιφάνεια όπου αναπτύσσεται η δεδομένη μαγνητική δομή spin. Στις παρακάτω εικόνες (εικόνα 9 & 10) παρατίθενται μια σειρά παραδειγμάτων διαφορετικών παραλλαγών κατά τις οποίες μεταβάλλεται ο αριθμός περιέλιξης, η πολικότητα και η κυκλοφορία της καμπύλης. [15]



Εικόνα 9 Διάφοροι αριθμοί περιέλιξης γύρω από ένα συγκεκριμένο σημείο. [8]



Εικόνα 10 Παραδείγματα κυκλοφορίας(c) και πολικότητας (p) ανάλογα με την φορά και την κατεύθυνση τους. [8]

Μια μαγνητική δομή κατά την οποία συμβαίνει τοπική αντιστροφή της μαγνήτισης, μπορεί να εμφανιστεί είτε σε μια επιφάνεια είτε στον όγκο ενός μαγνητικού υλικού. Οι δύο αυτές περιπτώσεις ανάλογα με την ιδιομορφία που εμφανίζουν τα spin μπορούν να χαρακτηριστούν ως Μαγνητικά Σκυρμιόνια. Αποτελούν τοπολογικές μη-τετριμμένες χειρόμορφες μαγνητικές δομές που μπορούν να σχηματιστούν σύμφωνα με τον ανταγωνισμό διαφόρων ενεργειακών και μη αλληλεπιδράσεων στον χώρο, έχοντας διαστάσεις που κυμαίνονται από δεκάδες μέχρι και εκατοντάδες νανόμετρα. Η ανακάλυψη τους σε μη κεντροσυμμετρικούς μαγνήτες και λεπτά μαγνητικά υμένα έχει οδηγήσει σε πολλές εφαρμογές, έχοντας ως κυριότερες τις λογικές πύλες και τις συσκευές αποθηκευτικού χώρου όπου τα σκυρμιόνια θα λειτουργούν ως φορείς για την εκτέλεση λογικών πράξεων και τη μεταφορά πληροφοριών αντίστοιχα. [16]. Σε ένα σκυρμιόνιο, τα spins περιστρέφονται

σταδιακά με μια σταθερή συμπεριφορά χειρομορφίας από την προς τα πάνω κατεύθυνση στο ένα άκρο προς την κάτω κατεύθυνση στο κέντρο και στην αρχική κατεύθυνση πάλι στην απέναντι άκρη, όπως δείχνει η κάτωθι εικόνα. [17]



Εικόνα 11 Πιθανές διαμορφώσεις *spin* που σχηματίζουν σκυρμιόνια με διαφορετική τοπολογική μορφή. Το αριστερό χαρακτηρίζεται ως Néel και το δεξί ως Bloch τύπου [17]

Οι συνηθισμένες μορφές σκυρμιονίων (εικόνα 11) είναι οι ακόλουθες: α) Néel τύπου και β) Bloch τύπου, όπου στο πρώτο οι ροπές αντιστρέφονται σταδιακά κατά μήκος της ακτίνας μεταβάλλοντας την γωνία μεταξύ 0 και 180 μοιρών με τον άξονα z και στο δεύτερο οι ροπές σχηματίζουν μια περιστροφή γύρω από το κέντρο με γωνίες περίπου 90 μοιρών με τον ίδιο άξονα. Αυτό σημαίνει ότι το κάθε ένα έχει διαφορετική κατεύθυνση αντιστροφής της μαγνήτισης. [17]

Η ιστορία των μαγνητικών σκυρμιονίων ξεκινά από το 1962, όταν ο Tony Skyrme ξεκίνησε τη μελέτη πάνω σε ένα μοντέλο νουκλεονίου. Στόχος του ήταν να περιγράψει τον σχηματισμό ενός σταθερού πεδίου το οποίο θα επικεντρώνεται σε ένα μη-γραμμικό μοντέλο. Η διαπίστωση αυτή βρήκε εφαρμογές στο συμπύκνωμα Bose-Einstein, υπεραγωγούς και χειρόμορφους υγρούς κρυστάλλους. Δύο δεκαετίες αργότερα, οι Bogdanov και Yablonskii βασιζόμενοι στις υποθέσεις του προηγούμενου Skyrme, πρόβλεψαν την ύπαρξη ορισμένων μικροσκοπικών μαγνητικών δινών. Αυτό έγινε σε θεωρητικό επίπεδο και συγκεκριμένα σε υλικά όπου οι κρυσταλλικές δομές τους εμφανίζουν χαμηλή συμμετρία στις μοναδιαίες κυψελίδες. Η θεωρητική ανακάλυψη των μαγνητικών σκυρμιονίων σημειώθηκε τη δεκαετία του 1980. [18]

Η πειραματική ανακάλυψη της ύπαρξης των σκυρμιονίων συνέβη το 2009. Πιο αναλυτικά, η δοκιμή πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας σκέδαση νετρονίων σε *reciprocal* χώρο έχοντας ως υπόστρωμα MnSi. Μια άλλη πειραματική δοκιμή πραγματοποιήθηκε με τη

χρήση ηλεκτρονικής μικροσκοπίας Lorentz πάνω σε μαγνητικό υλικό $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$. Οι δύο αυτές δοκιμές αποτέλεσαν τα θεμέλια για μια σειρά νέων μελετών με στόχο τη διευκρίνιση ορισμένων χαρακτηριστικών, όπως είναι η μη-τετριμμένη τοπολογία, μικρό μέγεθος και η υψηλή κινητικότητα που εμφανίζουν με τη χρήση ηλεκτρικού ρεύματος. Μια αξιολογη διαπίστωση είναι το γεγονός ότι ένα μαγνητικό σκυρμιόνιο συμπεριφέρεται ως σωματίδιο, παρόλο που έχει διαστάσεις που εντοπίζονται στην κλίμακα των νανομέτρων. Επίσης, το κατώφλι της έντασης του ηλεκτρικού ρεύματος για την κίνηση τους είναι πολύ μικρότερο από το αντίστοιχο για την κίνηση των τοιχωμάτων μεταξύ διαφορετικών μαγνητικών περιοχών (magnetic domain walls). Όλα αυτά τα πλεονεκτήματα καθιστούν τα μαγνητικά σκυρμιόνια προσβάσιμα και ευέλικτα σε εφαρμογές όπως είναι η αποθήκευση πληροφορίας με χαμηλότερη κατανάλωση ενέργειας. Αυτός είναι και ο λόγος που η επιστημονική κοινότητα έχει αφιερώσει πολύ χρόνο και χρήμα για την πλήρη κατανόηση της συμπεριφοράς τους αλλά και σε ποια υλικά μπορούν να εντοπιστούν ευκολότερα. [18]

1.8) Dzyaloshinskii–Moriya interactions (DMI)

Η σταθεροποίηση των μαγνητικών σκυρμιονίων αποτελεί μεγάλη πρόκληση για την επιστημονική κοινότητα. Διάφοροι μηχανισμοί, όπως οι μεγάλης εμβέλειας αλληλεπιδράσεις μαγνητικών δίπολων, χαμηλής εμβέλειας αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής κλπ, συνεισφέρουν για τον σχηματισμό και τη διατήρηση των σκυρμιονίων. Ένας από τους σημαντικότερους μηχανισμούς θεωρούνται οι αλληλεπιδράσεις DM (Dzyaloshinskii-Moriya) οι οποίες καθιστούν σταθερά τα σκυρμιόνια στον χώρο. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές υποβοηθούν το μικρό μέγεθος, χειρομορφία και τη σταθερότητα των σκυρμιονίων στον χώρο ακόμα και σε περίπλοκες γεωμετρίες. [18]

Οι Dzyaloshinskii-Moriya αλληλεπιδράσεις εντοπίζονται κατά την σύζευξη μεταξύ spin και τροχιάς των εξωτερικών ηλεκτρονίων (SOT coupling), σε υμένα κατασκευασμένα μόνο από σιδηρομαγνητικά υλικά. Συγκεκριμένα εμφανίζονται όταν έχουμε μη-κεντροσυμμετρικούς κρυστάλλους σιδηρομαγνητών ή όταν διαθέτουμε ετεροδομές στις οποίες παρεμβάλλονται λεπτά στρώματα βαρέων μετάλλων. Αυτό το είδος αλληλεπιδράσεων ευνοείται με την έλλειψη αντιστροφής συμμετρίας (inversion symmetry) και ενισχύεται κατά τον προσανατολισμό 2 γειτονικών μαγνητικών ροπών προς την ίδια κατεύθυνση. Η περιγραφή των DM αλληλεπιδράσεων επιτυγχάνεται στο μοντέλο της Χαμιλτονιανής Heisenberg, το οποίο αναπαριστά την ιδιότητα γειτονικών spin S_i και S_j ενόψει απουσίας συμμετρίας να αλληλεπιδρούν και διατηρούν τον προσανατολισμό τους σύμφωνα με τον τύπο:

$$H_{i,jDMI} = D_{ij}(\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) [19] \quad (1.8)$$

Συστηματικές έρευνες πάνω στη σταθεροποίηση σκυρμιονίων σε θερμοκρασία δωματίου, απέδειξαν την ύπαρξη τους σε πολυεπίπεδα συστήματα, συνδυάζοντας ενεργειακούς όρους όπως η ενέργεια μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας με την αλληλεπίδραση DM. Αναλυτικότερα, σε πολλαπλά στρώματα με μαγνητικά λεπτά υμένα και μη μαγνητικά βαρέα μέταλλα, όπως για παράδειγμα σε πολλαπλά στρώματα Co, Ir, Pt, παρατηρήθηκε παρουσία της DMI αλληλεπίδρασης, η παραγωγή σκυρμιονίων στα στρώματα κοβαλτίου (Co). Υλικά όπως τα MnSi, FeGe και $Fe_{1-x}Co_xSi$, αποτελούν τα πιο δημοφιλή που μπορούν να φιλοξενήσουν μαγνητικά σκυρμιόνια. Αυτό ευθύνεται στην ασύμμετρη μαγνητική τάξη τους. Περισσότερα υλικά που έχουν δοκιμαστεί πειραματικά και έχει αποδειχθεί ότι είναι εφικτό να σχηματίσουν με τη βοήθεια των DMI σκυρμιόνια, παρατίθενται στην εικόνα 12. [17]

Υλικό	Τύπος σκυρμιονίου
MnSi	Bloch
Fe_{0.5}Co_{0.5}Si	Bloch
FeGe	Bloch
Cu₂OSeO₃	Bloch
Co₈Zn₉Mn₃	Bloch
Co₈Zn₈Mn₄	Bloch
GaV₄S₈	Néel
Co/Ru(0001)	Néel
Fe/Ir(111)	Néel
PdFe/Ir(111)	Néel
(Ir/Co/Pt)₁₀	Néel
Pt/Co/MgO	Néel
Pt/CoFeB/MgO	Néel
Pt/Co/Ta	Néel
Pd/Co₆₀Fe₂₀B₂₀/MgO	Néel
Ta/Co₂₀Fe₆₀B₂₀/MgO	Néel
Ir/Fe/Co/Pt	Néel
Pt/Gd₂₅Fe₆₆Co₉/MgO	Néel

Εικόνα 12 Παραδείγματα υλικών που εμφανίζουν μαγνητικά σκυρμιόνια. [8]

1.9) Εφαρμογές σκυρμιονίων

Η ραγδαία επιστημονική πρόοδος πάνω στη μελέτη και την πλήρη κατανόηση της συμπεριφοράς των σκυρμιονίων, στην οποία συγκαταλέγονται η παρατήρηση, σχεδιασμός και σταθεροποίηση τους, δημιουργεί την αντίληψη ότι υπάρχει μια πληθώρα εφαρμογών στις οποίες μπορούμε να εκμεταλλευτούμε τις ιδιότητες τους. Το γεγονός ότι πολλά υλικά, είτε είναι απλά κράματα είτε περίπλοκα multilayers, είναι πλέον ικανά να σχηματίσουν σκυρμιόνια και να τα διατηρήσουν σε διάφορες θερμοκρασίες, συμβάλει στην κυριαρχία

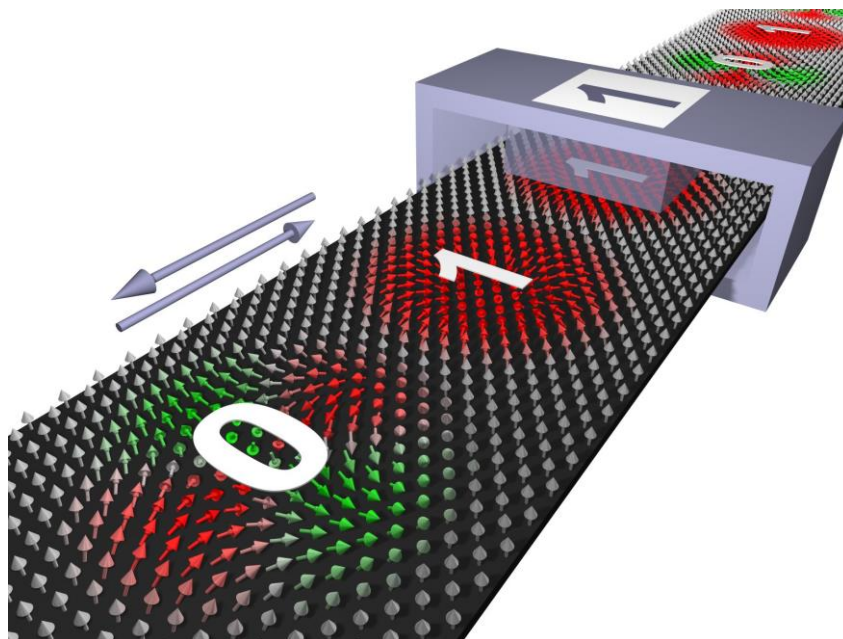
τους σε ποικίλες τεχνολογικές εφαρμογές. Στις ακόλουθες σελίδες θα επικεντρωθούμε σε τεχνολογικά επιτεύγματα που επικρατούν τα μαγνητικά σκυρμιόνια και εμφανίζουν βελτιωμένες ιδιότητες συγκριτικά με τις υπάρχουσες τεχνολογίες.

- Racetracks

Η τεχνολογία των Racetracks αποτελεί συσκευές μνήμης, οι οποίες βρίσκονται ακόμα σε πειραματικό στάδιο. Η βασική ιδέα τους είναι αποθήκευση δεδομένων με την χρήση και τη μετακίνηση σκυρμιονίων, πέρα από τη συμβατική εφαρμογή των domain walls. Ο λόγος που έχει προταθεί η παρουσία σκυρμιονίων, είναι διότι τα domain walls μπορούν να καλύπτουν όλο το πλάτος ενός racetrack, με αποτέλεσμα η μετακίνηση τους να είναι πολύ πιο δύσκολη σε αντίθεση με την ευελιξία του μικρού μεγέθους ενός σκυρμιονίου. Επιπλέον, η αδυναμία στη γρήγορη μετατόπιση των domain walls ευθύνεται στις ατέλειες που μπορεί να εμφανίζει το εκάστοτε υλικό του racetrack. Αντιθέτως, η χρησιμοποίηση σκυρμιονίων αντιμετωπίζει το πρόβλημα που εμποδίζει την εφαρμογή των τοιχωμάτων, χάρη στη δυνατότητα τους να μετακινούνται γύρω από ατέλειες, κάτι το οποίο έχει μελετηθεί θεωρητικά. Η λειτουργία ενός racetrack βασίζεται στην εγκάρσια κίνηση ενός σκυρμιονίου, και η παρουσία του σε ένα συγκεκριμένο σημείο υποδηλώνεται στο δυαδικό σύστημα με τον αριθμό 1. Αντίθετα, η απουσία του, όπως γνωρίζουμε θα μεταφράζεται ως 0. Με αυτόν τον τρόπο, γίνεται δυνατή η αποθήκευση δεδομένων παραδείγματος χάριν σε έναν σκληρό δίσκο, με μια θεωρητικά πιο εύκολη μέθοδο. Η παρακάτω εικόνα (εικόνα 13) δείχνει μια σχηματική απεικόνιση αναφορικά με το πως λειτουργεί μια στοιχειώδη διάταξη racetrack. [8]

Η ιδέα για την εφαρμογή των σκυρμιονίων ως στοιχειώδεις μονάδες αποθήκευσης πληροφορίας απαιτεί πολλές φορές την παρουσία Spin Orbit torques (SOT), σύμφωνα με ενδεδειγμένες πειραματικές μελέτες. Ουσιαστικά όταν έχουμε τέτοιου είδους ροπές, μπορούν να ενεργήσουν ορισμένες αλληλεπιδράσεις ελκτικά και απωθητικά μεταξύ διαφορετικών σκυρμιονίων, οι οποίες θα κρίνουν την ομαλή μετατόπιση κατά μήκος του racetrack. Ωστόσο, υπάρχουν και περιπτώσεις που τα σκυρμιόνια μπορούν να αλληλεπιδράσουν με τις παραπάνω ατέλειες ενός υλικού και αυτό να οδηγήσει στην ολοκληρωτική εξάλειψη τους, ταυτόχρονα με τη δεδομένη πληροφορία. Επιπλέον, η κίνηση τους επηρεάζεται από την εφαρμογή ηλεκτρικού ρεύματος ή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Η κατεύθυνση και το μέτρο και των δύο θα καθορίσουν την κατάσταση κίνησης ενός σκυρμιονίου (ακινητοποίηση, μετατόπιση ή εξάλειψη). Για να αποφύγουμε ανεπιθύμητα περιστατικά, βελτιώνουμε το υλικό και τη γεωμετρία του, εφαρμόζουμε διάφορες μετρήσεις με σκοπό να εντοπίσουμε τον καταλληλότερο συνδυασμό έντασης ηλεκτρικού ρεύματος και

μαγνητικό πεδίο, έτσι ώστε να εξασφαλίζεται η πετυχημένη και γρήγορη κίνηση των σκυρμιονίων. [8]



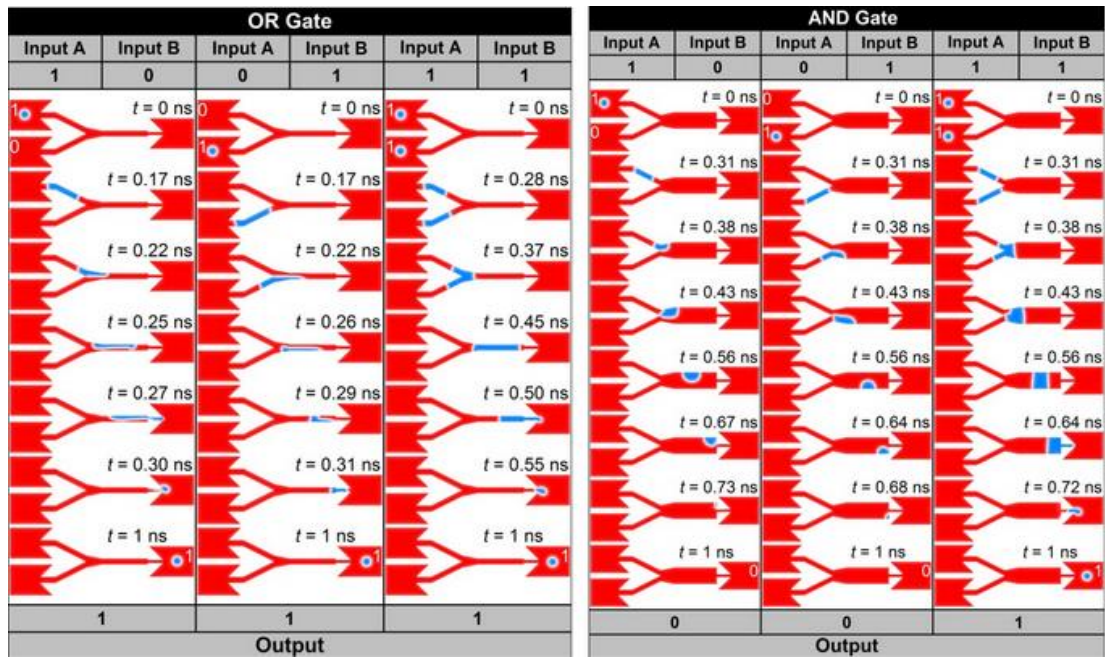
Εικόνα 13 Προσομοίωση για την αναπαράσταση της λειτουργίας ενός racetrack με την χρήση σκυρμιονίων. [20]

- Λογικές Πύλες

Ορισμένα ενδιαφέροντα οφέλη που παρέχουν τα σκυρμιόνια είναι το μικρό μέγεθος, η σταθεροποίηση και κίνηση τους, ακόμη και με χαμηλές εντάσεις ηλεκτρικού ρεύματος και η τοπολογική τους φύση. Όλα αυτά επιτρέπουν σε αυτές τις οντότητες να εφαρμοστούν και σε λογικές πύλες. Ουσιαστικά, οι λογικές πύλες εντοπίζονται σε ηλεκτρονικά κυκλώματα και επιτρέπουν την πραγματοποίηση λογικών πράξεων κατά τις εισόδους τους παράγοντας την αντίστοιχη έξοδο. Στην περίπτωση μας, η εφαρμογή σκυρμιονίων σε συσκευές που διαθέτουν λογικές πύλες, βασίζονται προς το παρόν σε ακριβείς μικρομαγνητικές προσομοιώσεις, καθώς τα πειράματα δεν έχουν πραγματοποιηθεί επιτυχώς.

Βασικότερες λογικές πύλες που χρησιμοποιούνται σε υπολογιστικές διεργασίες είναι οι OR και AND. Εφόσον η λειτουργία τους έγκειται στο δυαδικό σύστημα, πρέπει να ερμηνευτούν σύμφωνα με τους αριθμούς 0 και 1, οι οποίοι και σε αυτήν την περίπτωση υποδηλώνουν την απουσία ή όχι ενός σκυρμιονίου αντίστοιχα. Η λειτουργία OR βασίζεται στις λογικές πράξεις: $0+0=0$, $0+1=1$, $1+0=1$ και $1+1=1$. Με άλλα λόγια, αν υπάρχει ένα σκυρμιόνιο σε μία τουλάχιστον από τις εισόδους της πύλης, θα εξέρχεται από την έξοδο της και θα σημειώνεται ως 1. Η παρουσία ενός σκυρμιονίου σε κάθε κλάδο/είσοδο προκαλεί τη συγχώνευση τους, με αποτέλεσμα πάλι την έξοδο ενός μοναδικού σκυρμιονίου ($1+1=1$). Η πύλη AND δουλεύει αθροιστικά και απαιτεί την παρουσία σκυρμιονίων και στις 2 εισόδους

για να έχουμε και στην έξοδο. Πιο αναλυτικά λειτουργεί ως εξής: $0+0=0$ και $1+1=1$. Αυτό σημαίνει ότι η παρουσία ενός μοναδικού σκυρμιονίου σε μία μόνο είσοδο οδηγεί αναγκαστικά στην εξάλειψη του, ενός αν έχουμε 2 διαφορετικά ένα σε κάθε είσοδο έχουμε πάλι συγχώνευση. Η μετακίνηση τους στις αντίστοιχες εξόδους απαιτεί πάλι τη κατάλληλη ένταση ηλεκτρικού ρεύματος, η οποία είναι αντιπροσωπευτική για κάθε υλικό που εφαρμόζεται σε μια λογική πύλη. Οι αναπαράσταση των αντίστοιχων λογικών πράξεων γίνεται στην εικόνα 14.



Εικόνα 14 Η λειτουργία λογικών πυλών OR και AND με την χρήση σκυρμιονίων σύμφωνα με τον X. Zhang και τους συνεργάτες του. [21]

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

Θεωρία Μικρομαγνητισμού

Διάρθρωση του κεφαλαίου:

- Ανάλυση των χαρακτηριστικών της μικρομαγνητικής θεωρίας
- Περιγραφή της δυναμικής της Μαγνήτισης ενός σώματος
- Παρουσίαση της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών
- Αναφορά στα υλικά που θα μελετηθούν

2.1) Εισαγωγή

Ο σχεδιασμός προϊόντων αποτελεί τις περισσότερες φορές μια χρονοβόρα και απαιτητική διαδικασία, κατά την οποία θα πρέπει να συνδέονται οι όσο το δυνατόν καλύτερες ιδιότητες του υλικού με τις απαιτήσεις του εκάστοτε αγοραστή. Στην σύγχρονη εποχή ένα πολύ σημαντικό εργαλείο που επιτελεί αυτό το σκοπό είναι οι υπολογιστικές προσομοιώσεις, οι οποίες συνδυάζονται με τα αντίστοιχα πραγματικά πειράματα για έναν πιο αποτελεσματικό σχεδιασμό. Η περίπτωση των μαγνητικών υλικών αποτελεί ένα τυπικό παράδειγμα στα οποία προσομοιώσεις μπορούν κάλλιστα να εφαρμοστούν. Συγκεκριμένα, υπάρχουν πολλά μοντέλα που επιτρέπουν την εκτέλεση προσομοιώσεων για τον σχεδιασμό συστημάτων αποθήκευσης δεδομένων σε σκληρούς δίσκους αλλά και στην ανάπτυξη μαγνητικών αισθητήρων για εφαρμογές στην αυτοκινητοβιομηχανία. Στις εν λόγω εφαρμογές, είναι πολύ σημαντικό να γνωρίζουμε την μικροδομή ενός μαγνητικού υλικού (όρια, μεγέθη και σχήματα κόκκων) καθώς είναι καθοριστική για την απόδοση ενός σιδηρομαγνήτη. Μια προσομοίωση μπορεί να ποσοτικοποιήσει το πόσο επιδρά η μικροδομή, έχοντας έτσι καλύτερα αποτελέσματα. Η χρήση υπολογιστικών μεθόδων γλιτώνει διάφορα προβλήματα όπως είναι η έλλειψη πρώτων υλών, χρήση ακριβών εργαστηριακών εργαλείων και σε συνδυασμό με την εξοικονόμηση χρόνου και χρήματος βοηθάει στην καλύτερη κατανόηση και εμβάθυνση στην συμπεριφορά των μαγνητικών υλικών. [22]

Η οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων μιας προσομοίωσης αποδεικνύει την χαρακτηριστική κλίμακα μήκους στην οποία δρα ένα υπολογιστικό μοντέλο. Η κλίμακα αυτή εκτείνεται από την περιοχή των νανομέτρων μέχρι και κάποιων μικρομέτρων. Ένα περιβάλλον με διαστάσεις λίγων νανομέτρων ευνοεί την χρήση μοντέλων που εξυπηρετούν την ατομική δυναμική spin. Όσο αυξάνεται το μέγεθος των διαστάσεων τόσο εφαρμόζεται και η μέθοδος

του Μικρομαγνητισμού. Συγκεκριμένα, το ιδανικότερο μέγεθος πρέπει να εξυπηρετεί 2 προϋποθέσεις:

1. Να είναι αρκετά μεγάλο έτσι ώστε τα διακριτά ατομικά spin να αντικατασταθούν από μια συνεχή κατανομή της μαγνήτισης.
2. Ταυτόχρονα να είναι αρκετά μικρό για να είναι ομαλή η μετάβαση της μαγνήτισης μεταξύ διαδοχικών μαγνητικών περιοχών του υλικού.

Μια πληθώρα σιδηρομαγνητικών υλικών έχει ως χαρακτηριστική κλίμακα μήκους της τάξης των λίγων νανομέτρων έως και μικρόμετρων. Αυτό σημαίνει ότι οι προσομοιώσεις πάνω σε αυτά τα υλικά θα περιλαμβάνουν «σώματα» τα οποία θα έχουν μήκος μεταξύ νανομέτρων και λίγων μικρόμετρων.

Ο μικρομαγνητισμός αναπτύχθηκε ως θεωρία αρκετά πριν την ανάπτυξη των σύγχρονων υπολογιστών. Ο μικρομαγνητισμός στοχεύει στην εκτίμηση της κατανομής της μαγνήτισης σε συνάρτηση με το εφαρμοσμένο πεδίο ή ρεύμα, έχοντας ως δεδομένα την δομή του υλικού και τις αλληλεπιδράσεις που αναπτύσσονται στο εσωτερικό του. [22] Στο παρόν κεφάλαιο αναλύονται εκτενέστερα οι θεμελιώδεις έννοιες του μικρομαγνητισμού, η εξίσωση LLG και η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών που εφαρμόστηκαν σε αυτήν την εργασία.

2.2) Μικρομαγνητισμός

Όπως αναλύθηκε στην προηγούμενη ενότητα, το μέγεθος της μαγνήτισης πρέπει να περιγράφεται με την μορφή συνεχούς συνάρτησης. Αυτό συμβαίνει γιατί η μαγνητική ροπή κάθε ατόμου οφείλει την ύπαρξή της στα στοιχειώδη ηλεκτρόνια τα οποία δύναται να εντοπίζονται σε όλη την μάζα του στερεού και όχι μόνο στον ενδοατομικό χώρο. Οι χρόνοι μέσα στο οποίο το ηλεκτρόνιο βρίσκεται μέσα στο αρχικό άτομο και στον υπόλοιπο χώρο διαφέρουν σημαντικά μεταξύ τους. Ωστόσο αυτό δεν επηρεάζει απαραίτητα την συνέχεια της μαγνήτισης ως προς τον χρόνο και τον χώρο. Ο λόγος που θέτουμε την συνάρτηση της συνεχής (χωρικά και χρονικά) είναι για να έχουμε όσο το δυνατόν λιγότερα υπολογιστικά προβλήματα. Αυτό σε συνδυασμό με την αντιμετώπιση απότομων μεταβολών της μαγνήτισης, στοχεύουμε στην απόκτηση ακριβών αποτελεσμάτων διαμέσου σχετικά περίπλοκων υπολογισμών.

Ο Μικρομαγνητισμός θέτει ορισμένα όρια ως προς ποια σημεία χρειάζεται να μελετήσουμε για την ερμηνεία της μαγνητικής κατάστασης ενός υλικού. Τα όρια αυτά σταματούν στις ατομικές διαστάσεις. Θα ήταν πολύ χρήσιμο να γνωρίζουμε τις αλληλεπιδράσεις που συμβαίνουν στο ατομικό επίπεδο αλλά για την περιγραφή της μαγνητικής συμπεριφοράς σε μακροσκοπικό επίπεδο μαζί με τις προστιθέμενες ατομικές

αλληλεπιδράσεις καθιστούν την διαδικασία εξαιρετικά δύσκολη έως και ακατόρθωτη. Επομένως έχοντας κατά νου τα παραπάνω, μπορούμε εύλογα να θεωρήσουμε την μαγνήτιση του υλικού σταθερή κατά μέτρο κάτι το οποίο απλοποιεί τους λοιπούς υπολογισμούς διότι ελαττώνονται οι βαθμοί ελευθερίας. [11]

2.3) Ενέργειες Μικρομαγνητισμού

Ο βασικότερος τρόπος προσέγγισης του μοντέλου του μικρομαγνητισμού, είναι με την συνολική ενέργεια που συνοδεύει το σύστημα κατά την διάρκεια μιας προσομοίωσης. Σύμφωνα με την θερμοδυναμική, ένα σύστημα περιγράφεται από την ελάχιστη τιμή της ελεύθερης ενέργειας Gibbs. Η ολική ενέργεια είναι η εξής:

$$E_{\text{tot}} = U - \int \mathbf{H}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{J}_s dV \quad (2.1)$$

Το H_{ext} δηλώνει το εφαρμοσμένο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο και J_s τη μαγνητική πόλωση. Το πρώτο τμήμα της εξίσωσης δηλώνει το σύνολο των ενεργειακών όρων που διέπουν την εσωτερική ενέργεια U του συστήματος. Σε αυτούς τους όρους συγκαταλέγονται: η Ενέργεια Ανταλλαγής, Ενέργεια Μαγνητοκρυσταλλικής Ανισοτροπίας, Ενέργεια Απομαγνήτισης και η Ενέργεια που ευθύνεται από την θερμότητα που απορροφά το σώμα. Ο δεύτερος όρος υποδηλώνει την αλληλεπίδραση του σώματος με το περιβάλλον (εξωτερικό μαγνητικό πεδίο) και ονομάζεται Ενέργεια Zeeman. Οι παραπάνω όροι σχετίζονται άμεσα με τα μαγνητικά χαρακτηριστικά του υλικού αυτού κάθε αυτού και περιγράφονται εκτενέστερα παρακάτω.

- Ενέργεια Ανταλλαγής

Τα σιδηρομαγνητικά υλικά εμφανίζουν ένα μοναδικό φαινόμενο που ονομάζεται αυθόρμητη Μαγνήτιση. Η κατάσταση αυτή οφείλεται στην δυνατότητα των γειτονικών στοιχειωδών μαγνητικών ροπών να αλληλεπιδρούν με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε να ευνοείται ο παράλληλος προσανατολισμός τους. Πρόκειται για ένα φαινόμενο κβαντομηχανικής φύσεως το οποίο οδηγεί σε μια τελική κατάσταση κατά την οποία σηματοδοτείται το ελάχιστο της ενέργειας με την παράλληλη ευθυγράμμιση των γειτονικών spin. Για να εμβαθύνουμε περισσότερο, η ενέργεια ανταλλαγής σχετίζεται με την Ενέργεια Coulomb 2 σωματιδίων με κυματοσυναρτήσεις που αλληλεπικαλύπτονται. Για αυτό το λόγο χρησιμοποιείται η χαμιλτονιανή Heisenberg για 2 γειτονικά spin. Ο λόγος που εκφράζει την ενέργεια Ανταλλαγής δίνεται ως εξής:

$$E_{ij} = -J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.2)$$

όπου J είναι το ολοκλήρωμα ανταλλαγής, \mathbf{S}_i και \mathbf{S}_j τα spin των δύο γειτονικών spin με ίσο μέτρο ($|\mathbf{S}_i|=|\mathbf{S}_j|=S$) και $\mathbf{n}_i=\mathbf{S}_i/S$ και $\mathbf{n}_j=\mathbf{S}_j/S$ τα μοναδιαία διανύσματα τους. Αντικαθιστώντας τα διανύσματα αυτά, ο νέος τύπος της ενέργειας ανταλλαγής δίνεται ως εξής:

$$E_{ij} = -J_{ij}S^2\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j = -J_{ij}S^2\left[1 - \frac{1}{2}(\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_j)^2\right] \quad (2.3)$$

Επομένως η ολική ενέργεια ανταλλαγής ενός σιδηρομαγνητικού υλικού δίνεται ως το άθροισμα όλων των μεμονωμένων spin, και συγκεκριμένα:

$$E_{ij} = \sum_{ij} -J_{ij}S^2\left[1 - \frac{1}{2}(\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_j)^2\right] \quad (2.4)$$

Ωστόσο πρέπει να λάβουμε υπό όψη ότι η μαγνήτιση πρέπει να είναι συνεχής συνάρτηση σύμφωνα με το μοντέλο του μικρομαγνητισμού. Επομένως η παραπάνω εξίσωση πρέπει να προσαρμοστεί κατάλληλα σύμφωνα με την σχέση:

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}) = 1 - \frac{1}{2}[\mathbf{m}(\mathbf{r}) - \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r})]^2 \quad (2.5)$$

Όπου το $\Delta\mathbf{r}$ συμβολίζει την απόσταση μεταξύ 2 συζευγμένων μαγνητικών ροπών και m την συνεχής μαγνήτιση. Αν αναπτύξουμε το $m(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r})$ και λάβουμε μόνο τους όρους πρώτης τάξης ισχύει:

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}) \approx 1 - \frac{1}{2}\sum_i(\Delta\mathbf{r}\nabla m_i)^2 \quad (2.6)$$

Αν αθροίσουμε διανυσματικά όλες τις συνεισφορές από τις ατομικές μαγνητικές ροπές που βρίσκονται σε απόσταση $\Delta\mathbf{r}_i$, τότε μπορούμε να λάβουμε την συνολική Ενέργεια ανταλλαγής του σώματος με όγκο Ω ως:

$$E = \int_{\Omega} \sum_i A_i * \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}_i) d\mathbf{r} \quad (2.7)$$

με A να θεωρείται η σταθερά ανταλλαγής η οποία περιλαμβάνει το ολοκλήρωμα ανταλλαγής J και είναι αντιπροσωπευτική για κάθε υλικό και $d\mathbf{r}$ να ορίζεται το στοιχειώδες τμήμα του όγκου του σώματος ($d\mathbf{r}=dx \cdot dy \cdot dz$). Η τελική μορφή της εξίσωσης της ενέργειας ανταλλαγής η οποία περιορίζεται για κυβικά και ισοτροπικά υλικά είναι η εξής:

$$E = A \int_{\Omega} \sum_i (\nabla m_i)^2 d\mathbf{r} = A \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{m})^2 d\mathbf{r} \quad (2.8)$$

Η συγκεκριμένη έκφραση χρησιμοποιείται ευρέως για την προσέγγιση της κατάστασης ανταλλαγής σε πολλά σιδηρομαγνητικά υλικά και κυρίως στο πλαίσιο του μικρομαγνητισμού. Προσδιορίζοντας την σταθερά ανταλλαγής πειραματικά, έχουμε στην διάθεση μας την

ενέργεια ανταλλαγής σε ένα σύστημα όπου αλληλεπιδρούν οι μαγνητικές ροπές σύμφωνα με το μοντέλο του Coulomb.

- Ενέργεια Μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας

Η ιδιότητα της ανισοτροπίας εντάσσεται και στην περιγραφή της μαγνητικής κατάστασης ενός υλικού. Εξαρτάται από την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς των ηλεκτρονίων η οποία συνδέεται άμεσα με την κρυσταλλογραφική δομή του υλικού. Οι τροχίες των ηλεκτρονίων συγκεκριμένα συνδέονται με το είδος του κρυσταλλικού πλέγματος και από την αλληλεπίδραση τους με την ιδιοστροφομή τους (spin), αποδεικνύεται ότι επιδεικνύουν μια προτίμηση ως προς τον προσανατολισμό τους σε ορισμένες κρυσταλλογραφικές διευθύνσεις. Από αυτό γίνεται αντιληπτό ότι καθορισμένες κατευθύνσεις είναι πιο προτιμητέες για την μαγνήτιση ενός υλικού. Η ενέργεια μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας δίνεται με διαφορετικό τύπο για κάθε κρυσταλλική δομή. Για παράδειγμα, μια κυβική δομή διαθέτει κρυσταλλογραφική ανισοτροπία που δίνεται από τον εξής τύπο:

$$E_{\text{ani,cubic}} = K_1(\mathbf{r}) * \sum_{i \neq j} \gamma_1^2(\mathbf{r}) \gamma_2^2(\mathbf{r}) + K_2(\mathbf{r}) \gamma_1^2(\mathbf{r}) \gamma_2^2(\mathbf{r}) \gamma_3^2(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

έχοντας ως $\gamma_i(\mathbf{r})$ είναι η προβολή της κανονικής μαγνήτισης στους άξονες της κυβικής κυψελίδας και K_1 και K_2 είναι σταθερές πρώτης και δεύτερης τάξης.

- Μαγνητοστατική ενέργεια (Zeeman)

Η μαγνητοστατική ενέργεια ή αλλιώς Zeeman αποτελεί το αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης ενός υλικού με ένα σταθερό εξωτερικό πεδίο και δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$E_{\text{ext}} = - \int \mathbf{J} \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}} dV \quad (2.10)$$

- Ενέργεια απομαγνήτισης

Ο όρος αυτός αντιπροσωπεύει την ενέργεια λόγω της μαγνήτισης του υλικού από το μαγνητικό πεδίο που δημιουργεί το ίδιο το σώμα. Διαφορετικά μπορεί να προσεγγιστεί και ως διπολική αλληλεπίδραση των στοιχειωδών μαγνητικών ροπών. Ο τομέας του ηλεκτρομαγνητισμού μπορεί με μεγάλη ευκολία να περιγράψει την ενέργεια απομαγνήτισης κάνοντας χρήση τις θεμελιώδεις εξισώσεις του Maxwell και συγκεκριμένα:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.11)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = 0 \quad (2.12)$$

Με αυτόν τον τρόπο καταλήγουμε σε έναν τελικό τύπο που υποδηλώνει την ενέργεια απομαγνήτισης:

$$E = -\frac{\mu_0}{2} \mathbf{M} \mathbf{H}_{\text{demag}} d\mathbf{r} \quad (2.13)$$

Ο ανταγωνισμός όλων των παραπάνω ενεργειακών ορών καθορίζει την μαγνητική κατάσταση ενός υλικού με αποτέλεσμα την περιγραφή διαφόρων φαινομένων, συμπεριλαμβανομένων και των σκυρμιονίων. Όλες οι διαφορετικές μορφές ενέργειας που μπορούν να συμμετέχουν κατά την διάρκεια μιας μικρομαγνητικής προσομοίωσης, συνεισφέρουν στην ολική δυναμική του συστήματος αυτού. Υπάρχουν διάφορες σχέσεις για να εκφράσουμε πως μεταβάλλεται η δυναμική ενός σώματος και πως αυτή ευθύνεται για την μεταβολή της μαγνήτισης ενός σώματος, τα οποία θα αναλυθούν στην επόμενη ενότητα. [8]

2.4) Δυναμική του Μικρομαγνητισμού

Γνωρίζουμε από το προηγούμενο κεφάλαιο ότι όλα τα υλικά μπορούν να εμφανίσουν μαγνητική συμπεριφορά σε κάποιο βαθμό. Με άλλα λόγια κάθε υλικό όταν βρίσκεται μέσα σε ένα ομογενές μαγνητικό πεδίο μπορεί να αποκτήσει μια αισθητή μαγνήτιση. Ωστόσο αυτό μπορεί να ισχύει μόνο σε μακροσκοπική κλίμακα. Η μαγνητική συμπεριφορά του καθορίζεται πλήρως από την δυναμική κατάσταση των στοιχειωδών μαγνητικών ροπών του. Κατά την σημαντικότερη κατηγορία μαγνητικών υλικών: οι σιδηρομαγνήτες αποτελούνται από άτομα όπου στις περισσότερες περιπτώσεις κάτω από την θερμοκρασία Curie δεν δύναται να έχουν μηδενική μαγνήτιση. Η δυνατότητα αυτή οφείλεται όχι μόνο στις πολλές αλληλεπιδράσεις που ευνοούν την παράλληλη ευθυγράμμιση των ροπών αλλά και στην ηλεκτρονιακή δομή που εμφανίζουν τα εν λόγω μεταλλικά στοιχεία (ή κράμματα μεταλλικών στοιχείων). Η σημαντικότερη είναι φυσικά η αλληλεπίδραση ανταλλαγής και ακολουθεί η μαγνητοκρυσταλλική ανισοτροπία, το πεδίο απομαγνήτισης, η θερμοκρασία του συστήματος κλπ. Εφόσον γνωρίζουμε τα είδη των αλληλεπιδράσεων που καθορίζουν την αυθόρμητη μαγνήτιση ενός σιδηρομαγνήτη, είναι εύλογο να μπορούμε να περιγράψουμε με μια διαφορική εξίσωση την κατεύθυνση όπου ακολουθεί η μαγνήτιση σύμφωνα με την δυναμική του συστήματος.

Η Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) εξίσωση είναι μια μη-γραμμική διαφορική εξίσωση με μεγάλη σημασία στον τομέα των μαθηματικών αλλά και στην φυσική. Έχει άμεση σχέση με την δυναμική αρκετών φαινομένων (σιδηρομαγνητικά υλικά, συστήματα δινών/στροβιλισμών και κινούμενων καμπυλών χώρου κλπ) και συνδέεται με πολλές διαφορετικές εξισώσεις που επεκτείνονται και στην φυσική των σολιτονίων. Οι Landau και

Lifshitz πρότειναν τον αρχικό τρόπο περιγραφής της δυναμικής της μαγνητικής κατάστασης όλων των spin ενός συστήματος, τα οποία εξαρτώνται από την θέση και τον χρόνο. Το 1954, προτάθηκε από τον Gilbert μια δεύτερη καλύτερη και επικρατέστερη μορφή της εξίσωσης η οποία βασίζεται στην Λαγκραζιανή προσέγγιση. Η τελική εξίσωση μετονομάστηκε στην προαναφερθείσα LLG. [23]

Η περιγραφή των κινητικών φαινομένων της μαγνήτισης όταν ο ρυθμός μεταβολής του πεδίου είναι της ίδιας κλίμακας με την συχνότητα μετάπτωσης των μαγνητικών ροπών, δίνεται από την εξίσωση Landau-Lifshitz (1935). Συγκεκριμένα δίνεται από τον εξής τύπο:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H}) - \frac{\mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{H})}{\tau M_s^2} \quad (2.14)$$

η οποία παρατηρούμε ότι μας δείχνει πως μπορεί να μεταβληθεί η μαγνήτιση του υλικού χρονικά. [3]

Η LLG εξίσωση με την χρήση της μαγνητικής επαγωγής B εμφανίζεται με διαφορετική μορφή:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \frac{\gamma}{1+\alpha^2} (\mathbf{M} \times \mathbf{B}_{\text{eff}}) - \frac{\alpha\gamma}{(1+\alpha^2)|\mathbf{M}|} \mathbf{M} \times (\mathbf{M} \times \mathbf{B}_{\text{eff}}) \quad [24] \quad (2.15)$$

Η μετάβαση στην LLG λόγω της προσθήκης του Gilbert παράγει την άνω εξίσωση που προσεγγίζει την δυναμική της μαγνήτισης με διαφορετικό τρόπο.[8] Η διαφορά με την LL έγκειται στις σταθερές που χρησιμοποιούνται, καθώς α είναι η φαινομενική αδιάστατη σταθερά απόσβεσης που καθορίζεται από το υλικό και προσδιορίζει τον ρυθμό με τον οποίο εξελίσσεται η μετάβαση της μαγνήτισης και γ ο γυρομαγνητικός λόγος των ηλεκτρονίων.

Ο πρώτος όρος των εξισώσεων αντιπροσωπεύει την κίνηση που ακολουθεί το διάνυσμα της μαγνήτισης γύρω από το διάνυσμα του αποτελεσματικού πεδίου B_{eff} . Το εν λόγω πεδίο αποτελείται από όλες τις επιμέρους συνεισφορές που συντελούν το μαγνητικό πεδίο το οποίο επηρεάζει την κατεύθυνση της μαγνήτισης. Συγκεκριμένα δίνεται ως εξής:

$$B_{\text{eff}} = B_{\text{ext}} + B_{\text{exch}} + B_{\text{anis}} + B_{\text{demag}} + B_{\text{thermal}} + B_{\text{DM}} \quad (2.16)$$

Οι συνεισφορές στο ολικό πεδίο είναι αντιστοίχως: το εξωτερικό πεδίο, το πεδίο ανταλλαγής, το πεδίο ανισοτροπίας, το πεδίο απομαγνήτισης, το θερμικό πεδίο και το πεδίο που οφείλεται στην αλληλεπίδραση DM (Dzyaloshinskii–Moriya). Το θερμικό πεδίο υποδηλώνει την συνεισφορά της θερμοκρασίας στο σώμα σύμφωνα με τον τύπο του Brown:

$$\mathbf{B}_{\text{thermal}}(\mathbf{t}) = \mathbf{n}(\mathbf{t}) \sqrt{\frac{2\mu_0 \alpha k_B T}{M_s \gamma \Delta V \Delta t}} \quad (2.17)$$

και αντίστοιχα η συνεισφορά της αλληλεπίδρασης Dzyaloshinskii–Moriya υπολογίζεται ως εξής:

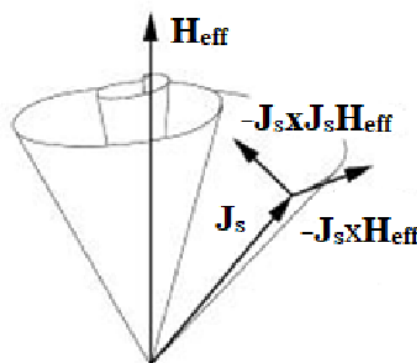
$$\mathbf{B}_{DM} = \frac{-2D}{M_s} [(\nabla \cdot \mathbf{m})\mathbf{z} - \nabla m_z] \quad (2.18)$$

Ορίζοντας ως D την σταθερά της αλληλεπίδρασης DMI η οποία είναι διαφορετική για κάθε υλικό. Ο συντελεστής $\eta(t)$ στο θερμικό πεδίο, αποτελεί τον συνδυασμό 3 τυχαίων συνιστωσών, οι οποίες μπορούν να δηλωθούν με την βοήθεια Y/H και συγκεκριμένα μιας γεννήτριας τυχαίων αριθμών. Η εξίσωση Brown δεν είναι ντετερμινιστική σε αντίθεση με τις προηγούμενες καθώς εισάγεται τυχαιότητα μέσω του στοχαστικού θερμικού όρου. Αυτό εκμεταλλευόμαστε στην παρούσα εργασία και παράγουμε μετά από κάθε χρονικό βήμα μια τυχαία τιμή για το $\eta(t)$. Έτσι το θερμικό πεδίο κατανέμεται με έναν πιο ακαθόριστο τρόπο. [25]

Η συχνότητα που συνοδεύει την μεταπτωτική κίνηση της μαγνήτισης ορίζεται ως

$$\omega = -\gamma H_{eff} \quad (2.19)$$

Ο δεύτερος όρος στην εξίσωση LLG περιλαμβάνει την διάχυση ενέργειας όταν πραγματοποιείται η μετάπτωση του διανύσματος της μαγνήτισης. Πρόκειται για μια φθίνουσα κίνηση (εικόνα 15) μέχρι το σημείο που η μαγνήτιση ταυτίζεται διανυσματικά με το αποτελεσματικό πεδίο. Το σημείο αυτό αποτελεί την θέση ισορροπίας και συνάμα το ελάχιστο της ολικής ενέργειας λόγω της απόσβεσης. Επομένως μια μικρομαγνητική προσομοίωση βασίζεται στην διαρκή επίλυση της δεδομένης εξίσωσης με στόχο την περιγραφή και κατανόηση μαγνητικών φαινομένων. [8]



Εικόνα 15 Σχηματική αναπαράσταση της φθίνουσας κίνησης που εκτελεί το διάνυσμα της μαγνήτισης γύρω από το διάνυσμα του αποτελεσματικού πεδίου [26]

2.5) Χρήση Πεπερασμένων διαφορών ως μέθοδο αριθμητικής επίλυσης

Προκειμένου να έχουμε επιθυμητά αποτελέσματα στον Μικρομαγνητισμό, πρέπει να προηγηθεί η ορθή επίλυση της διαφορικής εξίσωσης LLG. Όπως προαναφέρθηκε και στις

προηγούμενες ενότητες, πρόκειται για μια μη-γραμμική διαφορική εξίσωση που πρέπει να ολοκληρωθεί σωστά. Επί το πλείστον τα προβλήματα στον μικρομαγνητισμό αντιμετωπίζονται αποτελεσματικά με την χρήση αριθμητικών μεθόδων. Το πιο δύσκολο κομμάτι αποτελεί το τμήμα της εξίσωσης που περιλαμβάνει τους όρους που συντελούν το αποτελεσματικό πεδίο. Ο πιο εφικτός τρόπος είναι η διακριτοποίηση του συστήματος, δηλαδή ο διαχωρισμός του σώματος σε επιμέρους μικρότερα στοιχεία με πεπερασμένες διαστάσεις. Κάθε μεμονωμένο στοιχείο θα αλληλεπιδρά με τα υπόλοιπα και θα υπολογίζεται η κατάσταση της μαγνήτισης για το κάθε ένα ξεχωριστά. Στο τέλος η συνολική μαγνήτιση προκύπτει από την ολοκλήρωση όλων των στοιχείων. [27]

Η χρήση αριθμητικών μεθόδων για την επίλυση μικρομαγνητικών εξισώσεων απαιτεί την λεγόμενη διακριτοποίηση της συνεχούς κατανομής του μεγέθους της μαγνήτισης. Το μέγεθος της διακριτοποίησης δεν πρέπει να είναι μικρότερο από την ατομική πλεγματική σταθερά και τις περισσότερες φορές έχουν πολύ μεγάλη διαφορά μεταξύ τους. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα το εν λόγω φυσικό σύστημα να χρειάζεται λιγότερες μεταβλητές για να οριστεί καθώς οι μαγνητικές ροπές δεν αλλάζουν σημαντικά από το ένα σημείο του πλέγματος στο γειτονικό του λόγω της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής. Ωστόσο υπάρχει ένα χαρακτηριστικό μήκος στο οποίο μεταβάλλεται η μαγνητική πόλωση και εξαρτάται από της ιδιότητες του υλικού. Το μήκος χαρακτηρίζεται ως πλάτος μαγνητικού τοιχώματος (domain wall width). Επομένως όταν οι πεπερασμένες περιοχές που ικανοποιούν την διακριτοποίηση, έχουν μικρότερο μήκος από το πλάτος μαγνητικού τοιχώματος, τότε το σφάλμα στους υπολογισμούς παραμένει μικρό. Υπάρχουν πολλές ενδιαφέρουσες μέθοδοι αριθμητικής επίλυσης στο πλαίσιο του μικρομαγνητισμού, ωστόσο σε αυτήν την διπλωματική θα επικεντρωθούμε σε μία από τις πιο σημαντικές, την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών.[27]

Η επίλυση μια διαφορικής εξίσωσης που αποτελεί την βάση στο πλαίσιο του μικρομαγνητισμού απαιτεί ως αρχικό στάδιο τον πλήρη καθορισμό της συνολικής ενέργειας για μια γενική κατανομή της μαγνήτισης. Αυτό επιτυγχάνεται με την μετατροπή της ολικής ενέργειας σε μορφή ικανή έτσι ώστε να μπορεί να μεταφραστεί από έναν συγκεκριμένο αλγόριθμο. Στην συνέχεια θα ερμηνευτεί από το κατάλληλο υπολογιστικό σύστημα που διαθέτει πεπερασμένη ταχύτητα και αποθηκευτική μνήμη. Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών δεν βασίζεται σε ένα πεδίο συνεχούς λύσης. Αντιθέτως στοχεύει στην αντικατάσταση ενός διακριτού συνόλου από σημεία πλέγματος όπου σε κάθε σημείο θα αντικαθίσταται ένας διαφορικός τελεστής από έναν τελεστή πεπερασμένων διαφορών. [27]

Ο τρόπος επίλυσης με την βοήθεια των πεπερασμένων διαφορών αποτελεί μια προσεγγιστική λύση. Στη περίπτωση της εξίσωσης LLG, το αποτελεσματικό πεδίο H_{eff} πρέπει σε κάθε χρονικό βήμα να καθορίζεται ξανά από τον επιλεχθέντα αλγόριθμο. Ο υπολογισμός έγκειται στην άμεση ένταξη των διαφόρων τιμών των συνεισφορών του αποτελεσματικού πεδίου (πεδίο απομαγνήτισης, ανταλλαγής κλπ) υπολογίζοντας τους σε κάθε χρονικό βήμα. Ο πιο εύκολος τρόπος για την εξοικονόμηση χώρου και χρόνου είναι η αξιολόγηση της μαγνητικής πόλωσης σε ένα προκαθορισμένο πλέγμα. [27]

Στη μεθοδολογία των πεπερασμένων διαφορών, ορίζουμε ένα σύστημα το οποίο υποδιαιρείται σε επιμέρους διακριτά ορθογώνια υποσύνολα που συντελούν ένα ολοκληρωμένο πλέγμα. Αυτό σημαίνει ότι οι χωρικές παράγωγοι της μαγνήτισης μπορούν να προσεγγιστούν χρησιμοποιώντας n -διαφορετικά σημεία, όσα είναι και τα πεπερασμένα υποσύνολα που ικανοποιούν την διακριτοποίηση. Επιπροσθέτως μια διάταξη με ορθογώνια διακριτά σημεία συμβάλλει στον εύκολο υπολογισμό του πεδίου ανταλλαγής, δεδομένου του ότι η μαγνήτιση σε κάθε ορθογώνιο κελί θεωρείται ομοιόμορφη και συνεχής.

Δεδομένου ότι το δεξιό σκέλος της εξίσωσης LLG πρέπει να αποθηκεύεται διαρκώς κατά την διάρκεια μιας μικρομαγνητικής προσομοίωσης, η τεχνική των πεπερασμένων διαφορών θεωρείται ότι είναι σχετικά γρήγορη και ταυτόχρονα δεν χρειάζεται μεγάλο αποθηκευτικό χώρο. Ωστόσο υπάρχουν 2 κύρια μειονεκτήματα τα οποία είναι τα εξής:

1. Η αδυναμία αποθήκευσης δεδομένων σε συστήματα με πολύπλοκες γεωμετρίες (π.χ. όταν πρόκειται για καταστάσεις που εμπλέκονται καμπύλες). Σε αυτές τις περιπτώσεις η διακριτοποίηση του σώματος με ορθογώνια υποσύνολα είναι υπερβολικά δύσκολη έως και ακατόρθωτη.
2. Η χαμηλή αποτελεσματικότητα της τεχνικής αυτής για περιπτώσεις όπου στο χώρο ενός σώματος εμφανίζονται κενά (άδεια κελιά), τα οποία πιθανότατα να υποδηλώνουν τις ατέλειες του υλικού.

Αυτή η διπλωματική εργασία βασίστηκε σε ένα σχετικά καινούριο λογισμικό ανοιχτού κώδικα, το οποίο με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών βοηθάει στην επίλυση της LLG εξίσωσης και την εξαγωγή αποτελεσμάτων στο πλαίσιο του Μικρομαγνητισμού. Το λογισμικό ονομάζεται `muMax3` και είναι γραμμένο στις γλώσσες προγραμματισμού GO και CUDA. Η χρήση της γλώσσας CUDA επιτρέπει την χρήση κάρτας γραφικών ενός υπολογιστή (GPU) και της τοπικής μνήμης με στόχο την υλοποίηση των προσομοιώσεων. Το γεγονός ότι δεν χρειάζεται τον επεξεργαστή ενός υπολογιστή (CPU), προσδίδει μεγάλο πλεονέκτημα ως προς την αυξημένη ταχύτητα των υπολογισμών. Ωστόσο υπάρχει το μειονέκτημα ότι οι κάρτες

γραφικών έχουν περιορισμένη διάρκεια ζωής, που σημαίνει ότι με τον καιρό επηρεάζεται η απόδοση τους. Γι' αυτό πρέπει να αναλυθούν τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα της χρήσης κάρτας γραφικών για την εκτέλεση προσομοιώσεων.

Η χρήση κάρτας γραφικών για την εύκολη και γρηγορότερη πραγματοποίηση μιας προσομοίωσης σε υπολογιστή, αποτελεί μεγάλη αναβάθμιση στον τρόπο με τον οποίο αντιμετωπίζουμε διάφορα εμπόδια και καταστάσεις στην εξαγωγή αποτελεσμάτων. Γι' αυτό το λόγο έχει ξεκινήσει να εφαρμόζεται η χρήση GPU σε πολλά ερευνητικά πεδία. Πρέπει ωστόσο να γίνει αντιληπτό ότι η χρήση κάρτας γραφικών αποτελεί πολλές φορές πρόκληση που πρέπει να αντιμετωπιστεί άμεσα. Συγκεκριμένα:

- Η απόδοση μιας κάρτας γραφικών υπερέχει όταν πρόκειται για μεμονωμένους υπολογισμούς.
- Οι κάρτες γραφικών έχουν περιορισμένη γρήγορη ενσωματωμένη μνήμη.

Οι δυσκολίες αυτές μπορούν να αποτελέσουν σημαντικό εμπόδιο μέχρι και σήμερα όσον αφορά τον μικρομαγνητισμό. Αυτό όμως δεν σημαίνει ότι πρέπει να σταματήσει η ερευνητική κοινότητα την χρήση λογισμικών που βασίζονται στην λειτουργικότητα των GPU. Παρακάτω γίνεται η πλήρης ενδοσκόπηση πάνω στο λογισμικό `numax3` το οποίο χρησιμοποιήθηκε εκτενώς για την εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας και των δυνατοτήτων που παρέχει στο πλαίσιο του μικρομαγνητισμού.

Το πακέτο λογισμικού `numax3` αποτελεί ένα ανεπτυγμένο σύστημα για την εφικτή υλοποίηση μικρομαγνητικών προσομοιώσεων, το οποίο βασίζεται στην απόδοση της κάρτας γραφικών ενός υπολογιστή. Όπως αναφέρθηκε και πάνω, το γεγονός ότι χρησιμοποιείται η γλώσσα προγραμματισμού CUDA, προσδίδει τον χρήστη το πλεονέκτημα της ενισχυμένης λειτουργικότητας και της εξοικονόμησης αποθηκευτικού χώρου. Οι δυνατότητες του προγράμματος, του επιτρέπουν πολύπλοκους υπολογισμούς μέχρι και για συστήματα που διαθέτουν 16 εκατομμύρια κελιά. Επίσης είναι εύκολα διαχειρίσιμο, καθώς οι αρχάριοι χρήστες μπορούν να μάθουν σε σύντομο χρονικό διάστημα πως να συντάξουν έναν πηγαίο κώδικα ο οποίος θα κατασκευάζει μια στοιχειώδη προσομοίωση. Αυτό οφείλεται στο εύκολα κατανοητό γραφικό περιβάλλον που παρέχει το `numax3`. Οι πιο εξοικειωμένοι χρήστες μπορούν να καθορίσουν διάφορες παραμέτρους ανάλογα με τις δικές τους ανάγκες, έχοντας την ελευθερία που προσφέρει η γλώσσα προγραμματισμού Go. Γενικά έχει σημειωθεί μεγάλος αριθμός ερευνητών που έχουν πρόσβαση στο εν λόγω λογισμικό με αποτέλεσμα να υπάρχουν πάνω από 400 δημοσιεύσεις με αναφορά στο `numax3`. Αυτό δείχνει τις δυνατότητες που παρέχει. [19]

2.6) Υλικά προς μελέτη

Ο 21^{ος} αιώνας δηλώνεται ως μια εποχή που χαρακτηρίζεται κυρίως από την έκτακτη τεχνολογική εξέλιξη, έχοντας σημαντικό αντίκτυπο στην καθημερινή ζωή μας. Το hardware που συντελεί έναν ηλεκτρονικό υπολογιστή σημειώνει σημαντική ανάπτυξη ως προς τις μεμονωμένες λειτουργίες του, καθιστώντας έναν υπολογιστή ταχύτερο, αποδοτικότερο με νέες δυνατότητες και ευελιξίες. Ένα σημαντικό εργαλείο για την λειτουργία ενός υπολογιστή, αποτελεί το αποθηκευτικό μέσο, το οποίο πρέπει να διαθέτει υψηλή χωρητικότητα και γρήγορες ταχύτητες. Ένας σκληρός δίσκος πρέπει να ικανοποιεί αυτές τις δύο λειτουργίες, σε μια εποχή όπου εμφανίζεται μεγάλη ζήτηση για μέσα αποθήκευσης πληροφορίας με αυξανόμενη χωρητικότητα. Γι' αυτό κρίνεται αναγκαίος ο σχεδιασμός και η ανάπτυξη νέων τεχνολογιών που θα εφαρμοστούν στα μέσα αυτά έτσι ώστε να εξασφαλίσουμε συγκριτικά μεγαλύτερες αποδόσεις.

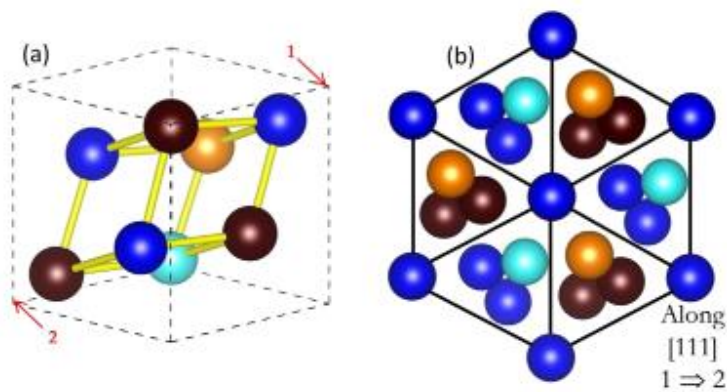
Το υλικό που πρωτοχρησιμοποιήθηκε και διατηρήθηκε για αρκετό καιρό ως μέσο εγγραφής σε κασέτες ηχητικής εγγραφής, βίντεο εγγραφής και παλιούς σκληρούς δίσκους είναι μικρά σωματίδια Μαγνητίτη (γ - Fe_2O_3). Έκτοτε, έχουν ανακαλυφθεί νέα υλικά τα οποία επιτελούν τον ίδιο σκοπό και μπορούν να σηματοδοτήσουν την χρήση νέων τεχνολογιών. Γνωρίζουμε ότι κατά την ψηφιακή μαγνητική εγγραφή, χρησιμοποιούνται μικροσκοπικές περιοχές πάνω στο επιλεγμένο μαγνητικό υμένιο (μέσο εγγραφής) που αποθηκεύουν την πληροφορία (bit) και λειτουργούν σύμφωνα με τον δυαδικό κώδικα (0,1). Η διεύθυνση της μαγνήτισης καθορίζει αν θα αποθηκευτεί η πληροφορία («1») ή όχι («0»). Για αυτό το λόγο είναι απαραίτητη η χρήση μόνιμου μαγνήτη ως αποθηκευτικό μέσο, έτσι ώστε η διεύθυνση της μαγνήτισης της εκάστοτε περιοχής να παραμένει ίδια για μεγάλο χρονικό διάστημα. Στόχος της επιστημονικής κοινότητας είναι η αύξηση της πυκνότητας εγγραφής το οποίο επιτυγχάνεται με την μείωση του μεγέθους της περιοχής πάνω στον σκληρό δίσκο, δηλαδή την μείωση των διαστάσεων ενός στοιχείου πληροφορίας (bit). Τα τελευταία χρόνια έχει σημειωθεί μεγάλη βελτίωση ως προς την πυκνότητα, αν αναλογιστούμε ότι το 1996 η πυκνότητα εγγραφής ήταν 1Gbit/in² με μέγεθος περιοχών 3 μm x 150nm, ενώ το 2006 είχαμε πυκνότητα 100 Gbit/in² με περιοχές 200nm x 25nm. Η εμφανής μείωση των διαστάσεων επιτρέπει την μεγαλύτερη αποθήκευση πληροφοριών. Σε αυτήν την διαδικασία μπορεί να γίνει και η χρήση σκυρμιονίων, τα οποία θεωρητικά τουλάχιστον είναι εφικτό να συμβάλλουν στην εξέλιξη των αποθηκευτικών μέσων. [3]

Την τελευταία δεκαετία, η ραγδαία τεχνολογική εξέλιξη πάνω στους σκληρούς δίσκους, επέτρεψε την πυκνότητα εγγραφής να αγγίζει μέχρι και τα 1000Gbit/in². Για να

συμβεί αυτό, θα πρέπει η παραμένουσα μαγνήτιση των εν λόγω στοιχείων να μην μεταβάλλει την διεύθυνση της σύμφωνα με την κρυσταλλική ανισοτροπία του υλικού που έχει επιλεχθεί ως υμένιο και να μην επηρεάζεται από τις εξώτερες περιβαλλοντικές συνθήκες.[2] Η χρήση σκυρμιονίων ως «στοιχεία» μεταφοράς πληροφοριών σε ένα σκληρό δίσκο αποτελεί μια καινοτόμο λύση, αρκεί να μπορούν να σχηματιστούν και να διατηρηθούν εύκολα. Ορισμένα υποψήφια υλικά τα οποία δύναται να φιλοξενήσουν σκυρμιόνια και μπορούν να αποτελέσουν υμένια σε σκληρούς δίσκους τελευταίας γενιάς συμμετείχαν σε μικρομαγνητικές προσομοιώσεις αυτής της διπλωματικής και είναι τα εξής: FeGe, CoPd και FePt. Περισσότερες πληροφορίες δίνονται παρακάτω.

- **FeGe**

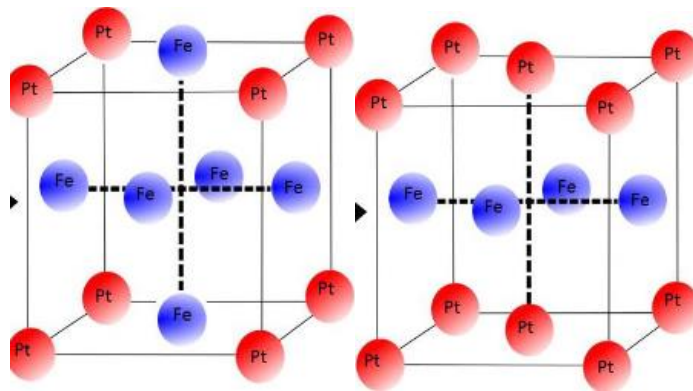
Το κράμα σιδήρου-γερμανίου χαρακτηρίζεται ως ένας προηγμένος σιδηρομαγνήτης που μπορεί εύκολα να σχηματίσει σκυρμιόνια σε όλη τη μάζα του. Αυτό συμβαίνει με την βοήθεια ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, με την ύπαρξη θερμοκρασίας στο σύστημα αλλά και με την εφαρμογή ηλεκτρικού ρεύματος. Ένα πλεονέκτημα είναι ότι η πυκνότητα ρεύματος που χρειάζεται για την μετακίνηση των σκυρμιονίων στην επιφάνεια του κράματος, είναι ένα εκατομμύριο φορές μικρότερη από την αντίστοιχη στα συμβατικά σιδηρομαγνητικά υλικά (σίδηρος, κοβάλτιο και νικέλιο). Η μοναδιαία κυψελίδα αποτελείται από δύο είδη ατόμων τα οποία μπορούν να διατάσσονται με πολλές παραλλαγές, επηρεάζοντας και τις μαγνητικές ιδιότητες τους. Πάραυτα η δυνατότητα του να σχηματίζει σκυρμιόνια με παρουσία πεδίου (αλλιώς χωρίς πεδίο δημιουργείται μια ελικοειδής κατανομή των ροπών) το καθιστά κατάλληλο για εφαρμογές που περιλαμβάνουν μέσα αποθήκευσης δεδομένων [29]. Η εικόνα 16 αναπαριστά την διάταξη της απλούστερης μοναδιαίας κυψελίδας, ενός κράματος που αποτελείται από Σίδηρο και Γερμάνιο.



Εικόνα 16 Αναπαράσταση της μοναδιαίας κυψελίδας FeGe. Αριστερά με μπλε και γαλάζιο αποτελούν τα άτομα Ge, ενώ με καφέ και πορτοκαλί τα άτομα Fe. Δεξιά είναι η δομή του κράματος για την κρυσταλλογραφική διεύθυνση [111]. [30]

- **FePt**

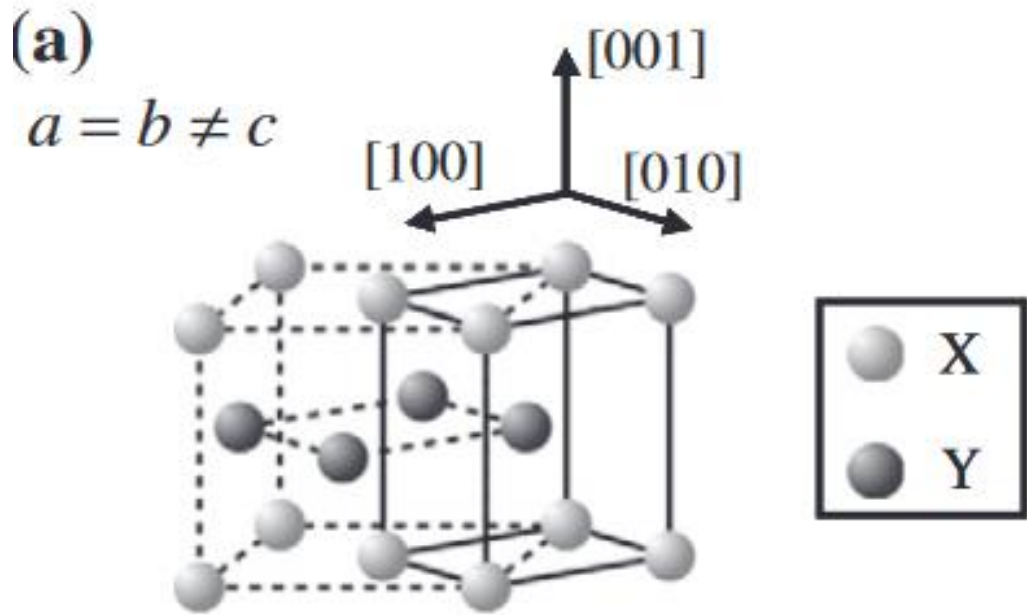
Το κράμα σιδήρου και πλατίνας αποτελεί υποψήφιο υποκατάστατο ως προς τους παλιούς σιδηρομαγνήτες χάρη στην δυνατότητα του για εύκολο σχηματισμό σκυρμιονίων. Τα νανοσωματίδια που μπορούν να δημιουργηθούν από FePt διαθέτουν πολύ μικρές διαστάσεις (λίγων νανομέτρων) που σημαίνει ότι συμβάλλουν στην αύξηση της πυκνότητας εγγραφής σε αποθηκευτικά μέσα. Το εν λόγω κράμα συναντάται σε δύο κρυσταλλογραφικές δομές: fcc και fct όπως δείχνει η εικόνα 17. Μπορεί να γίνει μετάβαση από την δομή fcc στην fct χρησιμοποιώντας την μέθοδο της θερμικής ανόπτησης.



Εικόνα 17 Η δομή fcc και fct για το κράμα FePt αντίστοιχα. [8]

- **CoPd**

Το κράμα Κοβαλτίου και παλλαδίου έχει προσελκύσει μεγάλο ερευνητικό ενδιαφέρον για τεχνολογικές εφαρμογές που περιλαμβάνουν μαγνητική εγγραφή με νέα μέσα κλπ, για το οποίο ευθύνεται και η υψηλή κάθετη μαγνητική ανισοτροπία που επιδεικνύει (Perpendicular Magnetic Anisotropy PMA). Η μοναδιαία κυψελίδα της κρυσταλλικής δομής εμφανίζεται με την μορφή $L1_0$ (εικόνα 18) για κράμα που εμφανίζει σύσταση $Co_{50}Pd_{50}$. Αυτή η κρυσταλλική δομή είναι μετασταθής, δεν εμφανίζεται τόσο σε δομές μεγάλου όγκου (bulk materials) αλλά κυρίως σε λεπτά φιλμ όπου το πάχος είναι της κλίμακας μερικών ή δεκάδων νανόμετρων, το οποίο είναι σκόπιμο για τις εφαρμογές που προορίζεται. Οι μαγνητικές ιδιότητες και κυρίως η ανισοτροπία του εξαρτώνται από την καλά καθορισμένη επιταξία που επιβλήθηκε (τεχνική ανάπτυξης υμενίων) για τα λεπτά φιλμ CoPd. Τέλος, με την βοήθεια των δυνατών αλληλεπιδράσεων Dzyaloshinskii–Moriya μπορούν εύκολα πειραματικά και υπολογιστικά να σχηματίσουν Néel σκυρμιόνια σε διάφορες θερμοκρασίες. [16]



Εικόνα 18 Δομή L10 για το κράμα CoPd. [16]

Τα συγκεκριμένα κράματα επιλέχθηκαν για περαιτέρω μελέτη των μαγνητικών ιδιοτήτων τους διότι μπορούν να εμφανίσουν ενδιαφέροντα αποτελέσματα για εφαρμογές της σπιντρονικής και να ανταγωνιστούν τους συμβατικούς σιδηρομαγνήτες. Στο επόμενο κεφάλαιο αναλύεται η υπολογιστική πορεία που ακολουθήθηκε για την εξαγωγή των μικρομαγνητικών προσομοιώσεων των παραπάνω υλικών.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Υπολογιστική Πορεία

Διάρθρωση του κεφαλαίου:

- **Ανάλυση των υπολογιστικών συστημάτων και λογισμικών που χρησιμοποιήθηκαν για τις προσομοιώσεις**
- **Περιγραφή της διαδικασίας που επιλέχθηκε για τα τρία υλικά που εφαρμόστηκαν στις προσομοιώσεις**

3.1) Εισαγωγή

Το υπολογιστικό κομμάτι αυτής της διπλωματικής αποτέλεσε την λεπτομερή και σταδιακή διαδικασία που έπρεπε να τηρηθεί έτσι ώστε να είναι επιτυχής η εξαγωγή των μικρομαγνητικών προσομοιώσεων. Τα βήματα που ακολουθήθηκαν με την πάροδο του ακαδημαϊκού έτους για την εκπόνηση της εργασίας είναι τα εξής:

1. Εξοικείωση με τις απαραίτητες εντολές που επιτρέπουν την εκτέλεση κώδικα σε περιβάλλον Linux.
2. Εκμάθηση του λογισμικού Mumax3, στην οποία συγκαταλέγονται η εμπειρία με το περιβάλλον που παρέχει, το API, οι διαφορετικές μεθοδολογίες με τις οποίες μπορούμε να ορίσουμε ένα σύστημα σε συνδυασμό με τις διάφορες παραμέτρους που μπορούμε να δηλώσουμε (θερμοκρασία, περιοδικότητα, γεωμετρίες κλπ).
3. Γνωριμία με το λογισμικό Visit, το οποίο μας παρέχει την δυνατότητα να παρακολουθήσουμε τα αποτελέσματα που εξάγει το Mumax3 και να επεξεργαστούμε τον τρόπο οπτικοποίησης της προσομοίωσης.
4. Κατασκευή κατάλληλου κώδικα με την γλώσσα προγραμματισμού Go με τον οποίο αποσκοπούμε στον σχεδιασμό του περιβάλλοντος της προσομοίωσης που θα πληροί τις απαραίτητες προϋποθέσεις για τα 3 προαναφερθέντα σιδηρομαγνητικά υλικά.
5. Αποθήκευση των δεδομένων που είναι χρήσιμα για την εξαγωγή των αντίστοιχων γραφικών παραστάσεων και την λήψη συμπερασμάτων.

Στις επόμενες ενότητες θα δοθεί βάση σε όλα τα επιμέρους στάδια που αναφέρθηκαν παραπάνω, έτσι ώστε να γίνει αντιληπτή η εργαστηριακή διαδικασία.

3.2) Λογισμικά

3.2.1) Linux

Οι διεργασίες για την πλήρη πραγματοποίηση των μικρομαγνητικών προσομοιώσεων εκτελέστηκαν σε περιβάλλον Linux. Ωστόσο επειδή ο Υπολογιστής που χρησιμοποιήθηκε διαθέτει λογισμικό Windows 11, έπρεπε να γίνει η χρήση κάποιου προγράμματος που θα αποτελεί τον συνδετικό κρίκο μεταξύ Linux και Windows. Το Wsl (Windows subsystem for Linux) μπορεί να ληφθεί από κάθε υπολογιστή που λειτουργεί με Windows. Στην ουσία παρέχει την δυνατότητα στους προγραμματιστές να εκτελούν διεργασίες σε περιβάλλον Linux χωρίς απαραίτητα την χρήση ξεχωριστής εικονικής μηχανής. Χρησιμοποιώντας την εντολή «wsl» (εικόνα 19) στο τερματικό (terminal) έχουμε την δυνατότητα να συντάξουμε, επεξεργαστούμε και να εκτελέσουμε ανοιχτό κώδικα σύμφωνα με το περιβάλλον που ορίζει το Linux χωρίς να το έχουμε εγκαταστήσει στον υπολογιστή μας.

```
Welcome to Ubuntu 22.04.2 LTS (GNU/Linux 5.15.90.1-microsoft-standard-WSL2 x86_64)
* Documentation: https://help.ubuntu.com
* Management:   https://landscape.canonical.com
* Support:      https://ubuntu.com/advantage
```

Εικόνα 19 Εκδοχή Ubuntu που χρησιμοποιήθηκε

Στο προηγούμενο κεφάλαιο, έγινε γνωστό ότι τα προγράμματα που θα χρησιμοποιηθούν για την εκτέλεση προσομοιώσεων, απαιτούν την ομαλή χρήση της κάρτας γραφικών του εκάστοτε υπολογιστή. Επιπλέον, γνωρίζουμε ότι η παρατεταμένη χρήση μιας GPU οδηγεί αργά ή γρήγορα στην μείωση της απόδοσης της. Επειδή για την αρχική εκμάθηση του προγράμματος Mumax3 και την μετέπειτα εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας, χρειάστηκε η εκτέλεση πολυάριθμων προσομοιώσεων, ορισμένων απλών αλλά ακόμα και μερικών χρονοβόρων. Στην ουσία οι εντολές δίνονταν από προσωπικό υπολογιστή, αφού πρώτα είχε προηγηθεί η μεταφορά του terminal σε έναν υπολογιστή της σχολής με το IP του εργαστηρίου. Επομένως, οι προσομοιώσεις εκτελούνταν σε διαφορετικό υπολογιστή, ενώ ο προσωπικός λειτουργούσε ως ο διαμεσολαβητής των εντολών, για την σύνταξη του κάθε κώδικα και την μετέπειτα αποθήκευση των δεδομένων. Η κάρτα γραφικών που επέτρεψε την ολοκλήρωση των simulations είναι η NVIDIA GeForce GTX 1650(3910MB). Παρακάτω δίνεται βαρύτητα για τον τρόπο που μπορεί να «χτιστεί» μια προσομοίωση με την χρήση του Mumax3.

Η ομάδα Dynamat LAB από το Πανεπιστήμιο του Ghent στο Βέλγιο ευθύνεται για τον σχεδιασμό και την τελειοποίηση του λογισμικού ανοιχτού κώδικα Mumax3. Η εκδοχή που

χρησιμοποιήθηκε είναι η: *mumax 3.10*. Οι γλώσσες προγραμματισμού που μπορούν να υποστηριχθούν κυρίως είναι οι Go και CUDA. Η πρώτη εφαρμόστηκε εκτενώς για την δημιουργία simulations, καθώς χαρακτηρίζεται για τον στατικό της χαρακτήρα. Συντακτικά εμφανίζει πολλές ομοιότητες με την γλώσσα προγραμματισμού C και παρέχει ασφάλεια μνήμης, συλλογή απορριμμάτων και χρήση στατικών τύπων. Η CUDA, αποτελώντας μια προέκταση της γλώσσας C, δημιουργήθηκε με στόχο την ενίσχυση της επεξεργαστικής ισχύς των GPU της NVIDIA και χρησιμοποιείται για τον προγραμματισμό εφαρμογών με αυξημένο υπολογιστικό φορτίο όπως το Mumax3.

3.2.2) API Mumax3

Το mumax3 προσπαθεί να επιτελέσει σε κάθε διεργασία 2 στόχους:

- I. Την διαρκή ολοκλήρωση της μαγνήτισης σε ένα σώμα ως προς τον χρόνο, δηλαδή σε κάθε κελί και μετά από κάθε χρονικό βήμα. Αυτό αποτελεί το δυναμικό κομμάτι του λογισμικού.
- II. Την ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση της ολικής μαγνητικής ενέργειας, δηλαδή την εύρεση σταθερών καταστάσεων που ευνοούν μια ελάχιστη τιμή της ελεύθερης ενέργειας. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί με αριθμητικές μεθόδους και συνιστά το στατικό κομμάτι. [31]

Η ολική μαγνητική ενέργεια περιγράφεται ως μια συνάρτηση όλων των επιμέρους ενεργειακών συνεισφορών: ενέργεια ανταλλαγής, ενέργεια ανισοτροπίας, θερμική ενέργεια, ενέργεια απομαγνήτισης κλπ, και υπολογίζεται ολοκληρώνοντας την σε ολόκληρο τον όγκο του υλικού. Η δυναμική της μαγνήτισης προσεγγίζεται όπως αναλύθηκε και στο κεφάλαιο 2 με την προσθήκη της εξίσωσης LLG (Landau-Lifshitz-Gilbert), η οποία επιλύεται διαρκώς. Το αποτελεσματικό πεδίο διαθέτει και αυτό τις αντίστοιχες συνεισφορές με τις ενέργειες (πεδίο απομαγνήτισης, ανισοτροπίας, ανταλλαγής, DMI). Επομένως, οι καταλληλότερες παράμετροι για την εξίσωση LLG, οι ενέργειες που συντελούν το σύστημα, η γεωμετρία και διαστάσεις αλλά και εξωτερικοί παράγοντες όπως είναι κάποιο μαγνητικό πεδίο και εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό ρεύμα πρέπει να καθοριστούν εξαρχής από τον εκάστοτε κώδικα, έτσι ώστε να μπορέσει το πρόγραμμα να επιλύσει όλα τα προβλήματα και να πραγματοποιήσει τους άνω στόχους αποτελεσματικά.

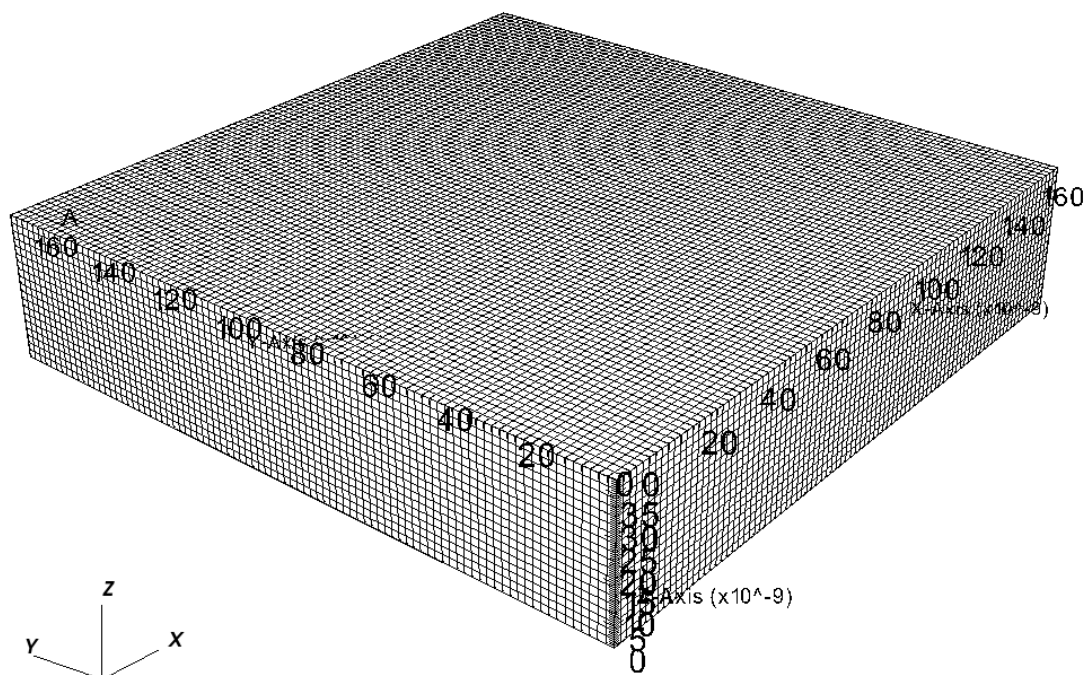
Το πρώτο βήμα για την σύνταξη ενός πηγαίου κώδικα είναι ο ορισμός της διακριτοποίησης και των διαστάσεων που θα έχει το εκάστοτε σώμα. Δεδομένου του ότι το πρόγραμμα λειτουργεί σύμφωνα με την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών, το κάθε κελί

θα έχει ορθογώνιο σχήμα όπου στο κάθε ένα θα ορίζεται μια τιμή της μαγνήτισης του υλικού. Οι εντολές που χρησιμοποιούνται για τον ορισμό του αριθμού των κελιών σε κάθε άξονα και των διαστάσεων του κάθε κελιού αντίστοιχα είναι οι εξής:

Setgridsize(Nx,Ny,Nz)

Setcellsize(dx,dy,dz)

Σύμφωνα με τις οποίες, θα έχουμε ένα «box» όπου θα έχει διαστάσεις $N_x \cdot dx$, $N_y \cdot dy$ και $N_z \cdot dz$ στους αντίστοιχους άξονες. Υπάρχει μία σημαντική προϋπόθεση που πρέπει να πληρείται, κατά την οποία το μέγεθος που διαθέτει κάθε κελί δεν πρέπει να υπερβαίνει το χαρακτηριστικό μήκος ανταλλαγής του υλικού αυτού κάθε αυτού. Ένα κελί με μεγαλύτερες διαστάσεις θα έχει ως αποτέλεσμα να αγνοούνται οι αλληλεπιδράσεις ανταλλαγής και να επηρεάζονται εσφαλμένα τα αποτελέσματα. Η εικόνα 20 δείχνει ένα τυπικό σώμα το οποίο έχει υποστεί την απαραίτητη διακριτοποίηση.



Εικόνα 20 Απεικόνιση ενός διακριτοποιημένου δοκιμίου που πρέπει να οριστεί για την εκτέλεση μιας προσομοίωσης

Πέρα από τον ορισμό των διαστάσεων όλου του περιβάλλοντος της προσομοίωσης, πρέπει να ακολουθήσει και ο καθορισμός του σχήματος που θα έχει και τον χώρο που θα καταλαμβάνει ο μαγνήτης που έχουμε επιλέξει. Το σώμα μπορεί να βρίσκεται στο εσωτερικό του περιβάλλοντος ή να καταλαμβάνει ολόκληρο το χώρο του. Προτού όμως καθοριστεί το

σχήμα που μας ενδιαφέρει, πρέπει να γνωρίζουμε ότι το κέντρο της προσομοίωσης βρίσκεται στο σημείο (0,0,0). Αυτό σημαίνει ότι αν το υλικό π.χ. έχει σχήμα τετραγώνου με πλευρά 100 νανόμετρα και καταλαμβάνει όλο το χώρο, τότε από την αρχή των αξόνων μέχρι την απέναντι πλευρά θα απέχει 50 νανόμετρα κάθετη απόσταση. Τέλος ο καθορισμός του σχήματος του μαγνητικού υλικού είναι πολύ χρήσιμος γιατί μπορούμε να ορίσουμε πολύπλοκες γεωμετρίες, διαφορετικές περιοχές και την μαγνήτιση τοπικά. Παρακάτω δίνονται τα σημαντικότερα σχήματα που μπορούν να οριστούν.

Circle(diameter)	Κύκλος(εισαγωγή διαμέτρου)
Cone(diameter, height)	Κώνος(διάμετρος, ύψος)
Cuboid(Lx,Ly,Lz)	Κυβοειδές (διαστάσεις)
Cylinder(diameter, height)	Κύλινδρος(διάμετρος, ύψος)
Ellipse(a,b)	Έλλειψη (a,b)
Ellipsoid(a,b,c)	Ελλειψοειδές(a,b,c)
Rect(Lx,Ly)	Ορθογώνιο(Lx,ly)
Square(L)	Τετράγωνο(L)

Τα παραπάνω σχήματα λειτουργούν ως εντολές όταν θέλουμε να ορίσουμε την γεωμετρία του σώματος μας. Για πιο περίπλοκα σχήματα υπάρχουν ορισμένες εντολές με τις οποίες μπορούμε να «διαγράψουμε» συγκεκριμένες περιοχές ή να προσθέσουμε, να περιστρέψουμε το σώμα στον άξονα που επιθυμούμε και να μεγεθύνουμε τις διαστάσεις ή αντίστροφα να τις σμικρύνουμε. Οι εντολές είναι οι εξής:

Transl(dx,dy,dz)
Scale(sx,sy,sz)
RotX(angle)
RotY(angle)
RotZ(angle)
Add(shape)
Sub(shape)

Γνωρίζουμε ότι λόγω των πεπερασμένων διαφορών, τα κελιά που χρησιμοποιούνται έχουν σχήμα κυβοειδές. Γι' αυτό το λόγο στην περίπτωση ενός κυκλικού σχήματος, χρησιμοποιούμε την εντολή **Edgesmooth**, κατά την οποία στοχεύουμε την εξομάλυνση των

άκρων που εμφανίζονται λόγω των ορθογωνίων κελιών (μέγιστη τιμή που μπορεί να λάβει είναι 8). Για να ορίσουμε την εκάστοτε γεωμετρία χρησιμοποιούμε την εντολή **setgeom(...)** και για να την αποθηκεύσουμε την **savegeom(όνομα)**.

Κατά την περίπτωση που θέλουμε να σχηματίσουμε κάποιο multilayer, πρέπει να ορίζουμε διαφορετικές περιοχές, όπου κάθε μία θα αντιπροσωπεύει και ένα υλικό. Στο Mumax3 μπορούν να οριστούν μέχρι και 256 διαφορετικές περιοχές. Η εντολή που μπορεί να ορίσει μια περιοχή είναι η **defregion(α,β)**, όπου ο α δηλώνει την αρίθμηση της περιοχής (η πρώτη δηλώνεται ως 0) και ο β δηλώνει το σχήμα που μπορεί να καταλαμβάνει. Μπορούμε να ορίσουμε μια περιοχή μέχρι ποιες τιμές στους άξονες X,Y,Z εκτείνεται με τις εντολές **Xrange(...)**, **Yrange(...)** και **Zrange(...)**. Σε κάθε περιοχή πρέπει στη συνέχεια να οριστούν οι κατάλληλες παράμετροι, οι οποίες είναι αντιπροσωπευτικές για κάθε υλικό.

Η σημαντικότερη παράμετρος που πρέπει να καθορίζεται είναι η αρχική μαγνήτιση. Το μέγεθος αυτό υποδηλώνει την μαγνητική κατάσταση που επικρατεί στο σώμα προτού ξεκινήσει η προσομοίωση. Μπορούμε να δηλώσουμε την μαγνήτιση να έχει διάφορες διαμορφώσεις. Η συνηθέστερη διαμόρφωση είναι η **uniform(X,Y,Z)**, κατά την οποία υπάρχει ομοιόμορφη μαγνήτιση σε μια δεδομένη κατεύθυνση. Άλλες είναι οι **vortex** (μορφή δίνης), **blochskymion**, **neelskymion** (σχηματισμός προυπάρχοντος Bloch και Néel σκυρμιονίου) και **RandomMag** όπου ορίζεται μια τυχαία κατανομή της μαγνήτισης. Ο ορισμός της μαγνήτισης σε κάθε περιοχή γίνεται ως **m.Setregion(αριθμός περιοχής, διαμόρφωση)** και σε κάθε σχήμα ως **m.setinshape(γεωμετρία, διαμόρφωση)**.

Ο τρόπος για να ορίσουμε ποιο σιδηρομαγνητικό υλικό πρωταγωνιστεί σε μια προσομοίωση, είναι με την προσθήκη των αντιπροσωπευτικών παραμέτρων του. Αυτές είναι:

1. **Msat**: η μαγνήτιση κορεσμού (A/m)
2. **Aex**: η σταθερά των αλληλεπιδράσεων ανταλλαγής (J/m)
3. **Ku1**: σταθερά 1^{ης} τάξης για μονοαξονική ανισοτροπία (J/m³)
4. **Ku2**: σταθερά 2^{ης} τάξης για μονοαξονική ανισοτροπία (J/m³)
5. **Dbulk**: σταθερά των DMI αλληλεπιδράσεων για όλο τον όγκο (J/m²)
6. **Dind**: σταθερά των DMI αλληλεπιδράσεων για την επιφάνεια (J/m²)
7. **Alpha**: σταθερά απόσβεσης για την LLG εξίσωση (αδιάστατη)
8. **anisU=vector(x,y,z)**: η κατεύθυνση για την μαγνητοκρυσταλλική ανισοτροπία

Παράλληλα με τις παραπάνω παραμέτρους, ανάλογα με τις ανάγκες πρέπει να ορίσουμε και κάποιους εξωτερικούς παράγοντες που δρουν στο υλικό μας. Αυτοί είναι το εφαρμοσμένο

μαγνητικό πεδίο ($\mathbf{B}_{\text{ext}} = \text{vector}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$) και η πυκνότητα του ηλεκτρικού ρεύματος ($\mathbf{J} = \text{vector}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$). Στην περίπτωση που θέλουμε να εφαρμόσουμε έναν βρόχο υστέρησης, πρέπει να ορίσουμε το βήμα με το οποίο θα αυξομειώνεται το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, και ποια δεδομένα θα αποθηκεύονται σε κάθε βήμα (πχ η μαγνήτιση κλπ). Επιπλέον αν θέλουμε η προσομοίωση να πραγματοποιηθεί με παρουσία θερμοκρασίας, ορίζεται ως **Temp**, διαφορετικά αν παραλειφθεί το σύστημα βρίσκεται στο απόλυτο μηδέν.

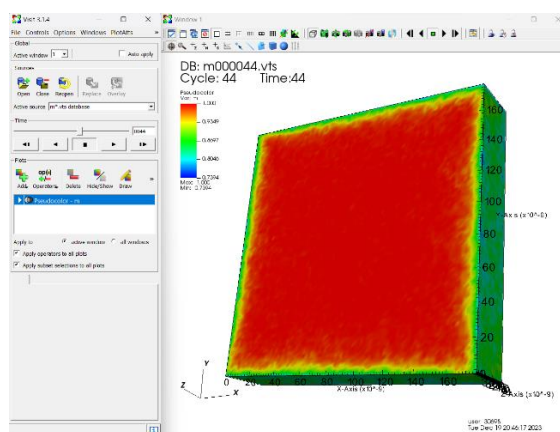
Η εντολή που χρειάζεται για να δώσει το έναυσμα για να ξεκινήσει η προσομοίωση είναι η **run(t)**, όπου στην παρένθεση αναγράφεται ο χρόνος (συνήθως σε nanosecond) κατά τον οποίο θα διαρκέσει όλο το simulation. Σημαντικό κομμάτι είναι ο καθορισμός των μεγεθών που θέλουμε να αποθηκευτεί στο σύστημα μέχρι την τελική διεξαγωγή της προσομοίωσης. Με την εντολή **autosave(μέγεθος, χρόνος)** αποθηκεύουμε το εκάστοτε μέγεθος που μας ενδιαφέρει κάθε χρονική στιγμή που ορίζουμε εμείς. Στην συνέχεια με το **tableautosave** μπορούμε να αποθηκεύσουμε όλα τα παραπάνω μεγέθη σε ένα ενιαίο αρχείο τύπου .txt έτσι ώστε να τα έχουμε συγκεντρωμένα. Τα σημαντικότερα από αυτά είναι τα εξής:

1. **m**: μαγνήτιση του υλικού (πχ **autosave(m, 0.1e-9)**)
2. **B_ext**: το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο
3. **E_anis**: η ενέργεια μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας
4. **E_demag**: η μαγνητοστατική ενέργεια
5. **E_exch**: η ενέργεια ανταλλαγής
6. **E_mel**: η μαγνητοελαστική ενέργεια
7. **E_therm**: η θερμική ενέργεια
8. **E_Zeeman**: η ενέργεια Zeeman
9. **Ext_phi**: η αζιμουθιακή γωνία κάθε μαγνητικής ροπής
10. **Ext_theta**: η πολική γωνία κάθε μαγνητικής ροπής
11. **ext_topologicalcharge**: το τοπολογικό φορτίο, δηλαδή ο αριθμός Skyrmion S.
12. **ext_bubblepos**: η τοποθεσία του πυρήνα ενός σκυρμιονίου
13. **ext_bubbledist**: η απόσταση που έχει διανύσει το σκυρμιόνιο
14. **ext_bubblespeed**: η ταχύτητα του σκυρμιονίου

Όλα αυτά τα μεγέθη αποτελούν τα αποτελέσματα της προσομοίωσης που καθορίσαμε εμείς σύμφωνα με τις ανώτερες εντολές και τα περισσότερα από αυτά μπορούν να παρατηρηθούν εκτενώς με ένα άλλο πολύ χρήσιμο πρόγραμμα το οποίο θα αναλυθεί παρακάτω.

3.2.3) Visit

Παραπάνω έγινε η περιγραφή του λογισμικού Mumax3 και των διαφορετικών σταδίων που πρέπει να ακολουθήσει ένας χρήστης έτσι ώστε να προχωρήσει στην οργάνωση μικρομαγνητικών προσομοιώσεων. Στις προηγούμενες παραγράφους έγινε λόγος για τα σημαντικότερα μεγέθη που μπορεί κάποιος να αποθηκεύει όσο «τρέχει» η προσομοίωση στο Mumax3. Τα εν λόγω μεγέθη μπορούν εύκολα να χρησιμοποιηθούν στην συνέχεια για την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων που εξήγαγε το λογισμικό με στόχο την απόκτηση μιας ολοκληρωμένης προσομοίωσης. Το πρόγραμμα visit χειρίζεται με μεγάλη ευκολία και απλότητα την παρουσίαση της μαγνητικής κατάστασης ενός σώματος, παρέχοντας μας ποικίλες δυνατότητες. Η εικόνα 21 παρουσιάζει το interface του προγράμματος visit.



Εικόνα 21 Το περιβάλλον στο οποίο μπορεί κανείς να τροποποιήσει και να προβάλει μια μικρομαγνητική προσομοίωση

Το visit όπως και το Mumax3, αποτελεί ένα λογισμικό ανοιχτού κώδικα που επιτρέπει την γραφική ανάλυση του για την επεξεργασία και την προβολή επιστημονικών δεδομένων. Κυρίαρχη λειτουργία του είναι η οπτικοποίηση βαθμωτών και διανυσματικών πεδίων σε δυσδιάστατα και τρισδιάστατα δομημένα πλέγματα. Αντλώντας τα σωστά αρχεία από το Mumax3, συμβάλλει στην μεταφόρτωση τους σε ένα οπτικό μέσο. Η εκδοχή που χρησιμοποιήθηκε σε αυτήν την εργασία είναι η: *visit 3.3.2*.

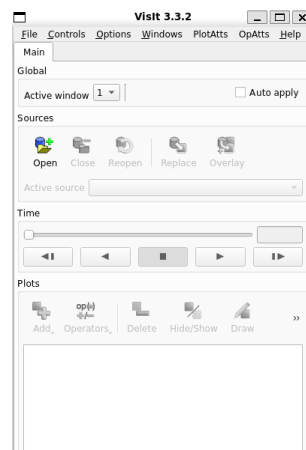
Τα αρχεία που προορίζονται για οπτικοποίηση συνήθως αποτελούν τα μεγέθη της μαγνήτισης, των διαφόρων ενεργειών και των γωνιών των στοιχειωδών μαγνητικών ροπών. Στο σύστημα αποθηκεύονται με την μορφή .onf (open visualization format). Στην ουσία αυτό το είδος αρχείων προορίζονται για λογισμικά που εκτελούνται σε εικονικές μηχανές (virtual machines). Επομένως μετά το πέρας μιας προσομοίωσης έχουμε στην διάθεση μας αρχεία (πχ m00005.onf) τα οποία υποδηλώνουν την μαγνητική κατάσταση τους σώματος. Ένα αρχείο onf (εικόνα 22) παρουσιάζεται σε μορφή δυαδικού κώδικα και για την χρήση του στο


```

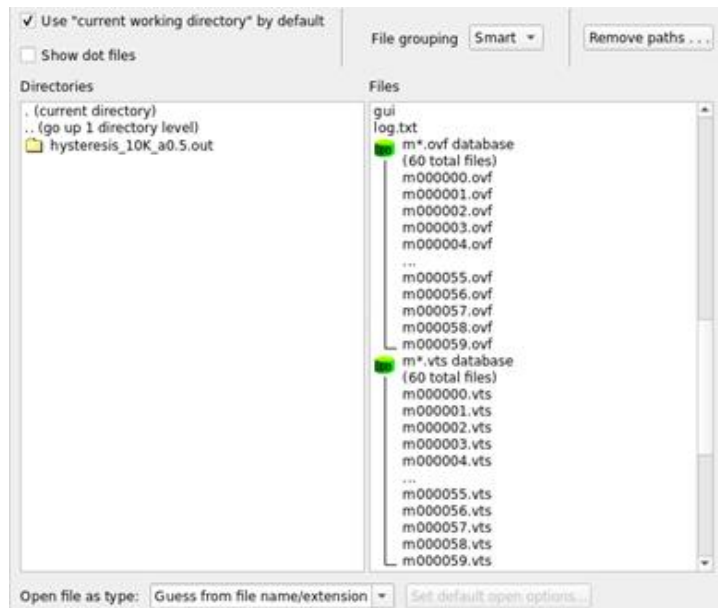
<?xml version="1.0"?>
<VTKFile type="StructuredGrid" version="0.1" byte_order="LittleEndian">
  <StructuredGrid WholeExtent="0 89 0 89 0 19">
    <Piece Extent="0 89 0 89 0 19">
      <PointData Scalars="Edens_exch">
        <DataArray type="Float32" Name="Edens_exch" NumberOfComponents="1" format="ascii">
          -191618.52 -158142.33 -138351.25 -106599.64 -104652.99 -153938.2 -121304.93 -117899.01 -142882.33 -135201.36 -116834
          .54 -51233.707 -66515.16 -130676.39 -132314.27 -132856.03 -106641.555 -88115.79 -57465.89 -94380.85 -129727.7 -122635.38 -113381.6 -127285.766 -87117.22 -86
          418.11 -116069.95 -94375.86 -82441.27 -129269.86 -142399.95 -126298.74 -113337.95 -94584.875 -122619.78 -123657.11 -113885.55 -104773.875 -108887 -153243.5
          -116228.46 -93574.38 -9231.805 -117393.68 -122957.74 -82282.26 -57247.13 -106510.0 -125211.484 -135776.97 -99881.164 -78321.734 -113246.07 -89818.5 -113984
          .3 -181785.164 -104774.2 -98781.38 -87989.26 -108495.04 -140847.39 -134944 -135246.22 -97327.22 -71326.42 -115936.16 -131654.27 -132381.31 -96783.62 -98649.
          4 -124436.586 -133727.6 -86724.586 -93276.8 -129248.695 -112884.7 -96740.37 -110167.24 -125667.02 -120474.72 -103955.555 -91271.74 -134440.9 -146909.58 -131
          996.53 -114008.7 -135782.4 -171368.86 -158385.17 -177873.27 -170344.1 -123426.7 -108626.664 -75492.96 -66335.53 -62783.137 -62081.46 -93466.59 -76405.68 -65
          169.27 -77699.76 -51056.715 -57780.586 -61468.805 -68493.52 -73398 -50885.11 -50857.742 -57381.504 -47033.652 -64298.16 -92707.76 -57207.273 -53497.266 -798
          43.08 -54428.04 -75101.17 -64453.58 -20461.15 -51367.94 -56491.188 -66740.2 -86103.445 -59818.816 -34153.156 -55778.06 -79636.28 -73041.016 -59093.754 -5550
          9.934 -51670.91 -19274.021 -59198.48 -180828.3 -58163.63 -26899.615 -16199.978 -63674.164 -73644.4 -89275.734 -19611.188 -15345.125 -73292.28 -52145.746 -69
          247.36 -75234.54 -72752.40 -59928.06 -48792.484 -35812.40 -32776.715 -305616.164 -88946.195 -66592.8 -58135.555 -62494.46 -86578.522 -21235.521 -60672.457 -
          58592.215 -53285.94 -68953.945 -72117.02 -64051.66 -64231.617 -28862.86 -36240.816 -76687.96 -87807.57 -88747.52 -32918.137 -47104.98 -93125.086 -93299.016
          -88706.7 -70636.01 -104798.58 -117987.42 -95350.664 -142777.12 -162658.19 -112077.01 -86274.016 -71913.49 -59267.61 -43133.77 -38926.58 -69922.76 -61947.17
          -66531.89 -58300.52 -43138.754 -41956.094 -67582.305 -79679.29 10486.533 41145.42 -15825.47 -76373.39 -16645.895 -25948.004 -44793.69 -49948.234 -29324.326
          -4996.0903 -42088.47 -37319.09 -47477.793 -36583.496 -34991.05 -31289.01 -66127.05 -74954.57 -20290.348 -31401.105 -76138.83 -54910.03 -42138.926 -24988.72
          -47130.367 -51926.176 9818.895 -41085.266 -29081.982 -58634.95 -63420.996 -11628.722 -34037.195 -45527.16 -63884.38 -58303.734 -34811.875 -52195.59 -57924.5
          47 -28999.934 -59788.68 -39918.816 -35365.883 -10518.112 2196.4624 -36165.746 -61826.883 -82153.65 -58086.39 -45255.14 -45557.516 -57469.156 10037.896 26113
          .744 -63881.695 -26293.684 -48683.09 -38259.764 -22916.295 -6511.8866 -22762.842 -26866.012 -72944.74 -57818.758 -36662.977 -39130.59 -56788.617 -86858.56 -
  
```

Εικόνα 248 Παρόμοιο αρχείο vts για την πυκνότητα της ενέργειας ανταλλαγής σε κάθε κελί.

Το κεντρικό μενού του προγράμματος visit (εικόνα 25 και 26) παρέχει πολλές δυνατότητες στον χρήστη. Το πρωταρχικό βήμα αποτελεί την εισαγωγή των απαραίτητων αρχείων με τα οποία θα διεξάγουμε την προσομοίωση. Με την εντολή *open* μας εμφανίζει ένα παράθυρο στο οποίο συγκαταλέγονται όλα τα αρχεία *onf* και *vts*. Επιλέγοντας τα δεύτερα, εισάγουμε στο σύστημα όλα τα δεδομένα που απαρτίζουν την ολοκληρωτική προσομοίωση. Στην συνέχεια με την εντολή *Add* μας δίνεται η δυνατότητα να επιλέξουμε την μορφολογία που θα έχει η κατανομή της μαγνήτισης μας. Οι πιο δημοφιλείς είναι η χρήση του *pseudocolor* όπου με διάφορες εναλλαγές του χρώματος μας παρουσιάζεται πως μεταβάλλεται η μαγνήτιση στο σώμα και η χρήση των *vectors* όπου εμφανίζονται μικρά διανύσματα για κάθε μαγνητική ροπή. Έπειτα χρειάζεται η εντολή *draw* και εμφανίζεται στο διπλανό παράθυρο η προσομοίωση μας. Υπάρχουν πολλές δυνατότητες τις οποίες μπορούμε να δούμε και στην εικόνα 25. Για παράδειγμα με το *OpAtts* μπορούμε να κάνουμε ανάλυση δεδομένων, να σχηματίσουμε ένα *slice* στην μέση το σώματος έτσι ώστε να μπορούμε να παρατηρήσουμε την μαγνήτιση στο εσωτερικό του, να κάνουμε *debugging* κλπ. Στην κατηγορία *PlotAtts* συμπεριλαμβάνονται όλες οι διαφορετικές μορφολογίες που μπορεί να έχει η κατανομή της μαγνήτισης και τέλος στο *Controls* ο χρήστης μπορεί να επεξεργαστεί τον τρόπο με τον οποίο παρουσιάζεται η προσομοίωση.

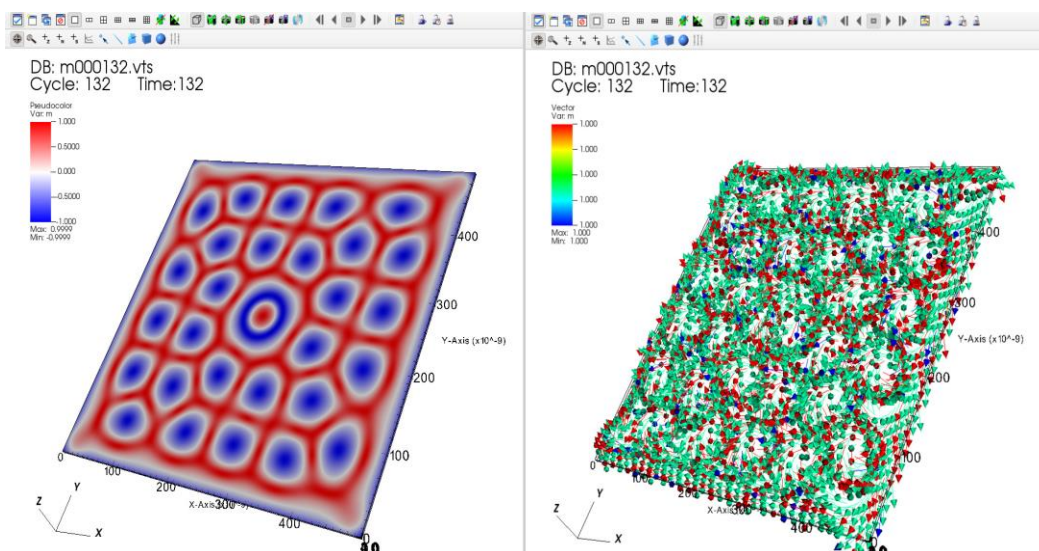


Εικόνα 259 Κεντρικό παράθυρο στο οποίο γίνεται η εισαγωγή αρχείων και η επεξεργασία της προσομοίωσης.

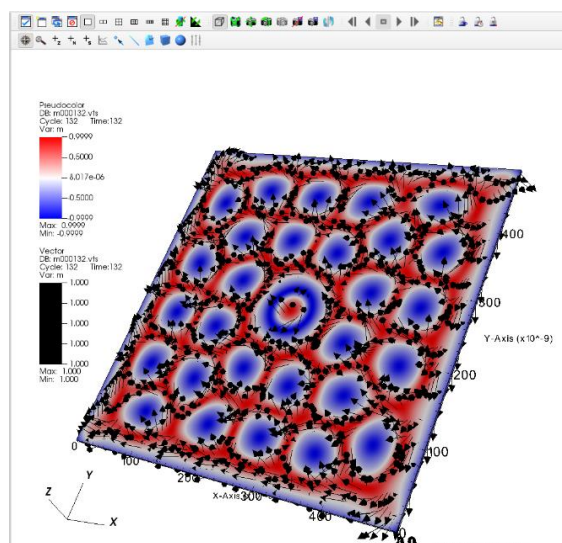


Εικόνα 26 Παράθυρο στο οποίο γίνεται η επιλογή των αρχείων που θα καθορίσουν την προσομοίωση.

Σε αυτήν την διπλωματική εργασία το γραφικό περιβάλλον της προσομοίωσης παρουσιάζεται με τους δύο τρόπους που αναφέρθηκαν παραπάνω. Ωστόσο για το σχηματισμό του καθενός θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί η κατάλληλη εντολή για την μετατροπή των ovf αρχείων. Το pseudocolour χρειάζεται την μορφή των vts με μόνο την συνιστώσα της μαγνήτισης στον z άξονα (άρα η παραπάνω εντολή με comp 2) ενώ το vector απαιτεί σαφώς και τις 3 συνιστώσες και παραλείπεται ο όρος comp (εικόνα 27). Υπάρχει και η περίπτωση να συνδυαστούν και τα δύο μαζί, δίνοντας έτσι μεγαλύτερη ευκρίνεια στην κατανόηση της μαγνητικής κατάστασης του εκάστοτε υλικού (εικόνα 28).



Εικόνα 27 Η εφαρμογή pseudocolour και vectors για την απεικόνιση της αντιστροφής της μαγνήτισης αντίστοιχα. Στη περίπτωση του pseudocolour είναι δυνατή η χρήση διάφορων εναλλαγών χρωμάτων και στο vector γίνεται η ρύθμιση του αριθμού και χρώματος των διανυσμάτων



Εικόνα 2810 Ο συνδυασμός pseudocolor και vectors

3.3) Εκτέλεση προσομοιώσεων για τα επιλεγμένα υλικά

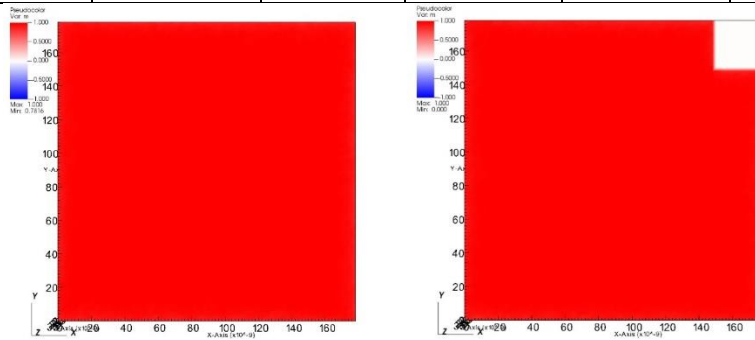
Όπως έχει αναφερθεί και πιο πάνω, τα υλικά που πρωταγωνίστησαν σε μικρομαγνητικές προσομοιώσεις είναι τα σιδηρομαγνητικά κράματα FeGe, CoPd και FePt, τα οποία διαθέτουν ενδιαφέρουσες μαγνητικές ιδιότητες και μεγάλες προοπτικές για εφαρμογές μαγνητικής εγγραφής. Στις επόμενες παραγράφους θα δοθεί βαρύτητα στις συνθήκες που επιλέχθηκαν για τις προσομοιώσεις κάθε υλικού, όπως είναι η γεωμετρία, η κατάλληλη θερμοκρασία, οι διαστάσεις της διακριτοποίησης σε κάθε κράμα και τα χαρακτηριστικά του βρόχου υστέρησης. Επιπλέον θα αναγραφεί και ο κώδικας που συντάχθηκε με τις διάφορες παραλλαγές λόγω διαφορετικών υλικών.

Για όλα τα υλικά εφαρμόστηκαν 5 διαφορετικές γεωμετρίες. Η πρωταρχική από την οποία προκύπτουν και οι υπόλοιπες, αποτελεί ένα κυβοειδές με διαστάσεις $180 \times 180 \times 40 \text{ nm}^3$. Η διακριτοποίηση ήταν διαφορετική για κάθε κράμα. Αυτό οφείλεται στο χαρακτηριστικό μήκος ανταλλαγής που έχει το κάθε υλικό. Δεδομένου του ότι δεν πρέπει το μέγεθος ενός cell να είναι μεγαλύτερο από το μήκος ανταλλαγής, σε κάθε υλικό ορίστηκε να προσεγγίζει την τιμή του exchange length αλλά να μην την ξεπερνά. Όπως αναγράφεται και στον παρακάτω πίνακα, το FeGe και το FePt εμφανίζουν σχετικά μεγάλο μήκος ανταλλαγής, το οποίο ευνοεί την διακριτοποίηση $dx=dy=dz=2 \text{ nm}$ με αποτέλεσμα το πλέγμα να ορίζεται ως $90 \cdot dx \cdot 90 \cdot dy \cdot 20 \cdot dz$. Αντιθέτως το CoPd εμφανίζει πολύ μικρό μήκος ανταλλαγής, που σημαίνει ότι τα cells είχαν διαστάσεις $dx=dy=dz=1 \text{ nm}$, άρα $180 \cdot dx \cdot 180 \cdot dy \cdot 40 \cdot dz$. Οι διαστάσεις αυτές εμφανίζονται και για τις 5 γεωμετρίες οι οποίες αναπαρίστανται στις εικόνες 29 και 30: απλό κυβοειδές, corner30x30(αφαίρεση ενός κύβου $30 \cdot 30 \cdot 40 \text{ nm}^3$ από την άνω δεξιά γωνία),

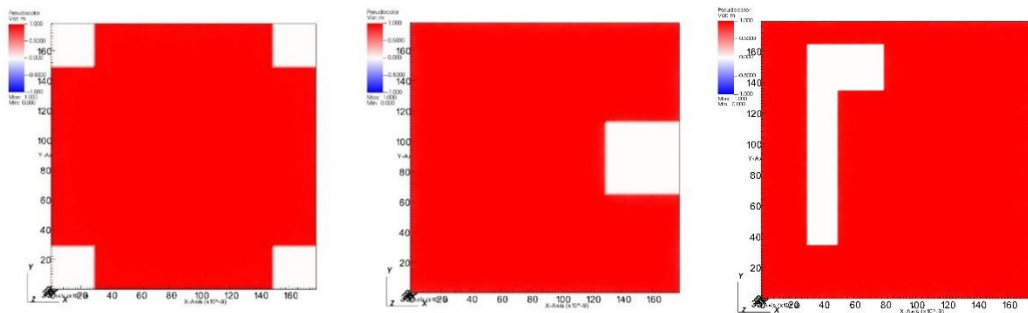
cross30x30(αφαίρεση παρόμοιων κύβων για τον σχηματισμό ενός σταυρού), c-type50x50(αφαίρεση ενός κύβου 50-50-40 nm³ από το μέσο της δεξιάς πλευράς) και η τελευταία που εμφανίζει στο εσωτερικό της μια ατέλεια που υποδηλώνει απουσία υλικού σε σχήμα «Γ».

Πίνακας 1 Παράμετροι των υλικών

Υλικά	Msat (MA/m)	Aex (pJ/m)	Ku (kJ/m ³)	Dbulk (mJ/m)	Lex (nm)
FeGe	0.384	8.78	-	1.58	9.67
CoPd	0.88	10	240	2	1.44
FePt	1.138	10	250	-	3.53



Εικόνα 29 Αριστερά η πλήρης γεωμετρία και δεξιά μετά την αφαίρεση ενός κύβου στην άνω δεξιά γωνία (corner30x30).



Εικόνα 3011 Αριστερά η γεωμετρία με σχήμα σταυρού(cross30x30), στο μέσο η γεωμετρία c-type50x50 και δεξιά η γεωμετρία με την ατέλεια.

Η θερμοκρασία που εφαρμόστηκε σε όλες τις προσομοιώσεις είναι 10K. Ορίζεται ως Temp και μαζί του ορίζεται και ο τρόπος με τον οποίο θα γίνει η επίλυση της διαφορικής εξίσωσης στην οποία εμπεριέχεται και η θερμοκρασία του συστήματος. Στο numax3 υπάρχουν διάφορες μεθοδολογίες (Euler, Heun, Bogaki-Shampine, Runge-Kutta, Dormand-Prince και Fehlberg) και από όλες αυτές επιλέχθηκε η μέθοδος του Heun με την εντολή **setsolver**. Η μεθοδολογία Heun, στοχεύει στη συνεχή επίλυση της εξίσωσης LLG, στην οποία συγκεντρώνονται όλες οι πιθανές δυνάμεις που ασκούνται στο σύστημα και επιδρούν στην

μαγνήτιση. Όλα τα πεδία (ανισοτροπίας, απομαγνήτισης, ανταλλαγής κλπ) είναι ντετερμινιστικά πλην του θερμικού πεδίου που έχει τυχαίο χαρακτήρα. Ο υπολογισμός του συντελεστή $\eta(t)$ της εξίσωσης Brown, πρέπει να γίνεται μετά από ένα timestep που καθορίζεται με την εντολή **FixDt**. Στην παρούσα εργασία το time step ορίστηκε ως 10^{-15} s, όπου το σύστημα μετά από κάθε βήμα επιδιώκει την εύρεση ελαχίστου της ελεύθερης ενέργειας Gibbs.

Ο λόγος που επιλέχθηκε η θερμοκρασία των 10K έγκειται στην μελέτη του αν σχηματίζονται εύκολα και μπορούν να διατηρηθούν τα μαγνητικά σκυρμιόνια και σε θερμοκρασία πέρα του απόλυτου μηδέν. Όπως θα παρατηρήσουμε και αργότερα η παρουσία θερμοκρασίας προκαλεί θόρυβο, δηλαδή ελαφρές ταλαντώσεις που εκτελούν οι μαγνητικές ροπές λόγω της θερμότητας, κάτι το οποίο δεν συναντάται σε θερμοκρασία 0 K.

Η επίλυση της Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) εξίσωσης πραγματοποιήθηκε σε αυτές τις προσομοιώσεις έχοντας ως σταθερά απόσβεσης (α_{LLG}) ίση με 0.5. Η τιμή αυτή επιλέχθηκε για να έχουμε γρήγορη απόσβεση της μαγνήτισης προς την κατεύθυνση του αποτελεσματικού πεδίου.

Η μελέτη ενός βρόχου υστέρησης έγινε για να παρατηρήσουμε την αλληλουχία μικρομαγνητικών καταστάσεων, δηλαδή σε ποιες μετασταθείς θέσεις θα ακολουθήσει η αντιστροφή της μαγνήτισης και πως θα επηρεαστεί ο αριθμός Skyrmion S όσο μεταβάλλεται το εξωτερικό πεδίο το οποίο έχει μόνιμη διεύθυνση στον άξονα z . Στην περίπτωση των παραπάνω υλικών, ξεκινάμε από μια μέγιστη τιμή του εξωτερικού πεδίου (1.5T) και μειώνουμε με μικρό βήμα μέχρι να φτάσουμε στην ελάχιστη τιμή που είναι -1.5T (όπου βρίσκεται στην αντίθετη κατεύθυνση από το μέγιστο πεδίο). Το βήμα που χρησιμοποιήθηκε για την περίπτωση του FeGe και του FePt είναι $\Delta B=0.01$ T ενώ για το CoPd ορίστηκε ως $\Delta B=0.05$ T. Η διαφορά πάλι έγκειται στο γεγονός ότι οι προσομοιώσεις για το CoPd καθίστανται πιο χρονοβόρες εξαιτίας της συγκριτικά μικρότερης διακριτοποίησης που επιβάλλει το μικρότερο μήκος ανταλλαγής του CoPd. Επομένως έχοντας βήμα 0.05T σημαίνει ότι θα αποθηκεύονται λιγότερα αρχεία άρα έχουμε λιγότερα frames, χωρίς όμως να επηρεάζονται δραματικά τα αποτελέσματα που θέλουμε. Επίσης επιλέχθηκε να καταγράφεται ο μισός βρόχος και στα 3 υλικά (δηλαδή τα 2 πάνω τεταρτημόρια), διότι τα υπόλοιπα 2 τεταρτημόρια διαθέτουν παρόμοια αποτελέσματα έχοντας αντιστροφή της κατεύθυνσης της μαγνήτισης και του πεδίου. Με αυτό το τρόπο εξοικονομούμε σημαντικότερο υπολογιστικό χρόνο.

Κάθε βήμα που διαγράφεται από τον βρόχο υστέρησης, αποθηκεύονται στο σύστημα οι εξής παράμετροι:

- Μαγνήτιση m
- Πυκνότητα Ενέργειας ανταλλαγής $Edens_exch$
- Πυκνότητα Ενέργειας Ανισοτροπίας $Edens_anis$
- Πυκνότητα Ενέργειας Απομαγνήτισης $Edens_demag$
- Πυκνότητα Ενέργειας Zeeman $Edens_Zeeman$
- Πυκνότητα θερμικής ενέργειας
- Πολική γωνία Ext_theta
- Αζιμουθιακή γωνία Ext_phi

Όλα αυτά μαζί με το τοπολογικό φορτίο (Skyrmion number S), τις συντεταγμένες του κάθε cell στο οποίο ανταποκρίνεται κάθε τιμή της μαγνήτισης και όλες οι τιμές του εξωτερικού πεδίου αποθηκεύονται σε ένα .txt αρχείο μετά το πέρας της κάθε προσομοίωσης. Παρακάτω δίνεται ο ολοκληρωμένος κώδικας που χρησιμοποιήθηκε μαζί με τις διάφορες παραλλαγές.

```

nx := 90
ny := 90
nz := 20
setgridsize(nx, ny, nz)
dx := 2e-9
dy := 2e-9
dz := 2e-9
setcellsize(dx, dy, dz)
cu := cuboid(nx*dx, ny*dy, nz*dz)
setgeom(cu)
m = uniform(1, 1, 1)
Msat = 0.384e6
Aex = 8.78e-12
Dbulk = 1.58e-3
alpha = 0.5
Temp = 10
fixdt = 1e-15
setsolver(2)
save(ext_phi)
save(ext_theta)
tableAdd(B_ext)
Bmax := 1.5
Bstep := 0.01
TableAdd(B_ext)
TableAdd(E_anis)
TableAdd(E_demag)
TableAdd(E_exch)
TableAdd(E_therm)
TableAdd(E_Zeeman)
TableAdd(ext_topologicalcharge)
for B := Bmax; B >= -Bmax; B -= Bstep {
  B_ext = vector(0, 0, B)
  autosave(m, 0.1e-9)
  autosave(ext_phi, 0.1e-9)
  autosave(ext_theta, 0.1e-9)
  autosave(Edens_anis, 0.1e-9)
  autosave(Edens_demag, 0.1e-9)
  autosave(Edens_exch, 0.1e-9)
  autosave(Edens_Zeeman, 0.1e-9)
  tableautosave(0.1e-9)
  run(0.1e-9)
}

```

Εικόνα 31 Ο ολοκληρωμένος κώδικας για την περίπτωση του $FeGe$ για την γεωμετρία του απλού κυβοειδούς. Για τα υπόλοιπα υλικά πρέπει να γίνει η αντικατάσταση των παραμέτρων από τον Πίνακα 1 και για την περίπτωση του $CoPd$ να αλλάξει η διακριτοποίηση και το θήμα δB .

Οι διάφορες παραλλαγές για τις υπολοιπες γεωμετρίες δίνονται στις ακόλουθες εικόνες:

```
cu := cuboid(nx*dx, ny*dy, nz*dz)
cub1 := cuboid(30e-9, 30e-9, 40e-9)
cub2 := cub1.transl(75e-9, 75e-9, 0)
cub3 := cu.sub(cub2)
setgeom(cub3)
m.SetInShape(cub3, uniform(1, 1, 1))
```

Εικόνα 3212 Ορισμός της γεωμετρίας corner30x30

```
cu := cuboid(nx*dx, ny*dy, nz*dz)
cub := cuboid(30e-9, 30e-9, 40e-9)
cub1 := cub.transl(75e-9, 75e-9, 0)
cub2 := cub.transl(-75e-9, 75e-9, 0)
cub3 := cub.transl(-75e-9, -75e-9, 0)
cub4 := cub.transl(75e-9, -75e-9, 0)
final := cu.sub(cub1).sub(cub2).sub(cub3).sub(cub4)
setgeom(final)
m.SetInShape(final, uniform(1, 1, 1))
```

Εικόνα 3313 Ορισμός της γεωμετρίας cross30x30

```
cu := cuboid(50e-9, 50e-9, 40e-9)
cu1 := cu.transl(65e-9, 0, 0)
final := sq.sub(cu1)
setgeom(final)
m.SetInShape(final, uniform(1, 1, 1))
```

Εικόνα 34 Ορισμός της γεωμετρίας ctype50x50

```
cu := cuboid(nx*dx, ny*dy, nz*dz)
cub1 := cuboid(20e-9, 130e-9, 40e-9)
cub2 := cub1.transl(-50e-9, 10e-9, 0)
cub3 := cuboid(30e-9, 30e-9, 40e-9)
cub4 := cub3.transl(-25e-9, 60e-9, 0)
cub5 := cu.sub(cub2).sub(cub4)
setgeom(cub5)
```

Εικόνα 3514 Ορισμός της γεωμετρίας με την ατέλεια

Η υπολογιστική αυτή πορεία ακολουθήθηκε για τα 3 επιλεγμένα σιδηρομαγνητικά κράματα χρησιμοποιώντας τον παραπάνω κώδικα γραμμένο στην γλώσσα προγραμματισμού GO. Εφόσον έχουν γίνει οι κατάλληλες αλλαγές για τις παραμέτρους του κάθε υλικού και για την γεωμετρία του σώματος, ακολούθησε η διεκπεραίωση των μικρομαγνητικών προσομοιώσεων με στόχο την συλλογή των απαιτούμενων δεδομένων. Το επόμενο κεφάλαιο βασίζεται στην παρουσίαση των αποτελεσμάτων και την εξαγωγή των αντίστοιχων συμπερασμάτων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

Αποτελέσματα και Συμπεράσματα

Διάρθρωση του κεφαλαίου:

- Παρουσίαση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων για κάθε υλικό και κάθε γεωμετρία ξεχωριστά.
- Σχολιασμός των δεδομένων.
- Εξαγωγή των κατάλληλων και απαραίτητων συμπερασμάτων.

4.1) Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο έγινε σαφής η υπολογιστική πορεία που εφαρμόστηκε πιστά για την διεκπεραίωση της διπλωματικής εργασίας μου. Πιο συνοπτικά, η εργασία έχει ως βασικό πυλώνα την ανάλυση των διαφόρων φαινόμενων από τα οποία διέπεται ο μαγνητισμός, την ερμηνεία της μαγνητικής κατάστασης ορισμένων σιδηρομαγνητικών υλικών και με ποιον τρόπο μπορούμε να εκμεταλλευτούμε την συμπεριφορά τους για τον σχηματισμό και την διατήρηση σκυρμιονίων. Κύριος στόχος είναι η μελέτη των τριών προαναφερθέντων υλικών (FeGe, FePt, CoPd) ως προς στην συμπεριφορά τους σε έναν τυπικό βρόχο υστέρησης και η παρατήρηση της δυνατότητας της συνεχόμενης αντιστροφής της μαγνήτισης αν ευνοεί την δημιουργία και διατήρηση ενός ή περισσότερων σκυρμιονίων σε κάθε υλικό.

















































































Τα αποτελέσματα που θα παρουσιαστούν σε αυτό το κεφάλαιο κατηγοριοποιούνται ανάλογα με το υλικό και την κάθε επιλεγμένη γεωμετρία ξεχωριστά. Αυτό σημαίνει ότι κάθε σχήμα θα συνοδεύεται με τις οπτικοποιήσεις των προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν μαζί με τις τιμές του εξωτερικού πεδίου και του αριθμού σκύρμιον S . Έπειτα θα ακολουθήσει ο σχολιασμός των εικόνων (πχ γιατί η μαγνήτιση επιλέγει να σχηματίσει τις εν λόγω διαμορφώσεις) και ποιοι παράγοντες έχουν το μεγαλύτερο μερίδιο ευθύνης. Επιπροσθέτως πρέπει να γίνει και η παρουσίαση γραφικών παραστάσεων οι οποίες δείχνουν την σχέση που εμφανίζεται μεταξύ του πεδίου και του αριθμού σκύρμιον. Τέλος, κρίνεται απαραίτητη και η εξαγωγή των αντίστοιχων συμπερασμάτων από την ενδιαφέρουσα συμπεριφορά κάθε σιδηρομαγνητικού υλικού, με απώτερο σκοπό την ενίσχυση της μελέτης των νέων αποθηκευτικών μεθόδων με την χρήση σύγχρονων σιδηρομαγνητών.

4.2) FeGe

Η παρουσίαση των αποτελεσμάτων ξεκινάει με το κράμα σιδήρου γερμανίου. Το εν λόγω κράμα είναι γνωστό ότι διαθέτει πολυκρυσταλλικότητα, δηλαδή πολυάριθμους κόκκους όπου ο καθένας συνιστά μια διαφορετική φάση ή μαγνητική περιοχή. Αυτό έχει ως συνέπεια την απουσία της μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας και για αυτό η μαγνήτιση του κράματος δεν επιδεικνύει προτίμηση για τον προσανατολισμό της ως προς κάποια διεύθυνση του πλέγματος. Επομένως όπως θα παρουσιαστεί και παρακάτω, η αντιστροφή της μαγνήτισης λόγω της μεταβολής του μέτρου και κατεύθυνσης του εξωτερικού πεδίου (καθώς το πεδίο βρίσκεται μονίμως προσανατολισμένο προς την z-διδεύθυνση) θα επηρεάζεται και από τους διάφορους άλλους ενεργειακούς παράγοντες πλην της ανισοτροπίας.

Κατά την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης, επιλέχθηκε η χρωματική αναπαράσταση να γίνεται σύμφωνα με την επιλογή *difference* για το pseudocolour από το λογισμικό *visit*. Οι παρακάτω εικόνες που θα προβάλλουν δεδομένες χρονικές στιγμές της προσομοίωσης, αναπαριστούν την συνιστώσα στον z-άξονα κάθε μαγνητικής ροπής και το χρώμα υποδηλώνει το μέτρο. Αυτό σημαίνει ότι το μέγεθος της μαγνήτισης ($m = M/M_s$) αποκτά το χρώμα κόκκινο για την τιμή $M = +M_s$ και μπλέ για την τιμή $M = -M_s$, όπου τα πρόσημα υποδηλώνουν την κατεύθυνση άνω και κάτω αντίστοιχα και οι υπόλοιπες αποχρώσεις αποδίδονται σε ενδιάμεσες τιμές (όπως και η μηδενική τιμή της μαγνήτισης ορίζεται ως λευκό χρώμα). Οι αναπαραστάσεις στην παρακάτω εικόνα ξεκινούν από μαγνητικό πεδίο $B = +0.6$ T μειώνοντας κάθε φορά κατά 0.1 T μέχρι την τιμή $B = -0.9$ T, όπου κάθε μαγνητικό πεδίο συνοδεύεται με το αντίστοιχο αριθμό *Skyrmion S*. Επιλέχθηκε το συγκεκριμένο πεδίο τιμών διότι για $B > 0.6$ T και $B < -0.9$ T δεν παρατηρούνται συγκριτικά σημαντικές αλλαγές στην διαμόρφωση της μαγνήτισης. Έπειτα θα ακολουθήσει και η αναπαράσταση των σχετικών μεταβολών των ενεργειών μετά από κάθε βήμα που μεταβάλλεται το επιβαλλόμενο πεδίο και οι γραφικές παραστάσεις $B_{ext}-S$ όλων των γεωμετριών συγκεντρωμένες σε ένα διάγραμμα για σύγκριση των αποτελεσμάτων.

Η παρακάτω εικόνα (εικόνα 36) συμπεριλαμβάνει όλες τις γεωμετρίες που εφαρμόστηκαν σε προσομοιώσεις, συγκεντρωμένες μαζί με τα πεδία που εφαρμόζονται και τους αντίστοιχους αριθμούς *skyrmion S*. Θα παρατηρήσουμε ότι μεταβάλλοντας ελαφρώς τον όγκο ενός υλικού, δεν επηρεάζονται πολύ τα αποτελέσματα μας. Εφόσον είναι μικρές οι εσοχές που θα δημιουργήσουμε και δεν διαταράσσεται η συμμετρία του χώρου, θα έχουμε τα ίδια αποτελέσματα στο ίδιο υλικό. Ωστόσο η αφαίρεση μεγάλων κομματιών από το νανοσωματίδιο προβάλλει διαφορετικές διαμορφώσεις στην μαγνήτιση.

FeGe					
$B(T)$	Full	Corner	Cross	C-type	Defect
0.6	 S=0.22	 S=0.23	 S=0.26	 S=0.14	 S=0.13
0.5	 S=0.25	 S=0.26	 S=0.29	 S=0.10	 S=0.16
0.4	 S=0.29	 S=0.30	 S=0.35	 S=0.07	 S=0.22
0.3	 S=0.31	 S=0.33	 S=0.42	 S=0.04	 S=-0.34
0.2	 S=0.22	 S=0.17	 S=0.43	 S=0.22	 S=0.38
0.1	 S=-0.71	 S=-0.91	 S=0.39	 S=-0.08	 S=0.01
0.0	 S=-1.22	 S=-1.03	 S=0.16	 S=0.01	 S=-0.09
-0.1	 S=-0.4	 S=-0.56	 S=-0.39	 S=-0.05	 S=-0.29
-0.2	 S=-0.07	 S=0.08	 S=0.51	 S=-0.21	 S=-0.25
-0.3	 S=0.63	 S=0.62	 S=0.56	 S=0.40	 S=0.57
-0.4	 S=0.69	 S=0.67	 S=0.64	 S=0.65	 S=0.72
-0.5	 S=0.73	 S=0.72	 S=0.69	 S=0.83	 S=0.82
-0.6	 S=0.77	 S=0.76	 S=0.74	 S=0.82	 S=0.85
-0.7	 S=0.8	 S=0.79	 S=0.76	 S=0.82	 S=0.88
-0.8	 S=0.83	 S=0.82	 S=0.78	 S=0.83	 S=0.89
-0.9	 S=0.85	 S=0.84	 S=0.81	 S=0.84	 S=0.9

Εικόνα 36 Εξέλιξη της μαγνήτισης με την μεταβολή του εξωτερικού πεδίου για όλες τις γεωμετρίες του FeGe και αναγραφή του αριθμού Skyrmion σε κάθε βήμα.

Η έναρξη της προσομοίωσης σηματοδοτεί την επιβολή του μαγνητικού πεδίου με τιμή $B=+1.5$ T. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η μαγνήτιση να προσπαθεί να προσανατολιστεί στην κατεύθυνση του πεδίου μιας και η αρχική της κατάσταση δηλώθηκε να είναι uniform (1,1,1), δηλαδή όλες οι ροπές προσανατολισμένες στην διαγώνιο των τριών αξόνων. Όσο μειώνεται το πεδίο, η μαγνήτιση περνά από διάφορες μετασταθείς καταστάσεις οι οποίες μας δείχνουν πως θα συμπεριφερθεί το εκάστοτε υλικό αν του επιβάλλουμε τη συγκεκριμένη τιμή πεδίου.

Ξεκινώντας με την ολόκληρη γεωμετρία χωρίς τις εσοχές (πρώτη στήλη αποτελεσμάτων), θα παρατηρήσουμε ότι η αισθητή εμφάνιση των «λευκών περιοχών» γίνεται όταν το πεδίο προσεγγίζει την τιμή $B= 0.6$ T. Στα στιγμιότυπα αυτά είναι δικαιολογημένοι οι πολύ μικροί αριθμοί Skyrmion (~ 0.2), καθώς η μαγνήτιση δεν έχει προλάβει ακόμα να σχηματίσει κάποια σκυρμιονική διαμόρφωση. Όσο ελαττώνεται το πεδίο, οδηγούμαστε σε μια αυξομείωση του αριθμού Skyrmion S , μέχρι την εμφάνιση μιας απεριγράφτης διαμόρφωσης που λαμβάνει σχήμα «X». Από εκεί και πέρα ο αριθμός S σημειώνει αύξηση. Όταν το πεδίο είναι 0.3 T τότε εμφανίζονται και οι μπλε περιοχές που υποδηλώνουν περιοχές του νανοσωματιδίου που η μαγνήτιση έχει αντιστραφεί πλήρως. Σε αυτά τα χωρία, οι ροπές βρίσκονται προσανατολισμένες προς τον $-z$ άξονα ενώ στο εσωτερικό των εν λόγω διαμορφώσεων οι ροπές είναι στον $+z$ άξονα (κόκκινο χρώμα). Μετά από την σταθεροποίηση του σχήματος «X», αρχίζει να περιστρέφεται προς τον σχηματισμό μια νέας διαμόρφωσης σε σχήμα «H». Υπάρχει μεγάλο ενδιαφέρον όταν μηδενίζεται το πεδίο, το οποίο μας δείχνει πως θα συμπεριφερόταν το νανοσωματίδιο FeGe αν βρίσκονταν εκτός πεδίου και σε θερμοκρασία 10 K. Στην ουσία εμφανίζει μια ελικοειδή δομή και αδυνατεί από μόνο του το υλικό να σχηματίσει σκυρμιόνια. Αυτό σημαίνει ότι κρίνεται αναγκαία η παρουσία εξωτερικών παραγόντων.

Μετά την αναίρεση του μαγνητικού πεδίου, ακολουθούμε την ίδια διαδικασία (με βήμα 0.01 T) προς την αντίθετη κατεύθυνση μέχρι την τιμή -1.5 T. Η ελικοειδής δομή συνεχίζει να περιστρέφεται μέχρι που μετατρέπεται σε μια διαμόρφωση με μορφή γραμμής (stripe) στο πεδίο -0.3 T. Το stripe με την αύξηση κατά μέτρο του πεδίου θα επιτρέψει τον σχηματισμό ενός μεμονωμένου Néel σκυρμιονίου και συγκεκριμένα με πεδίο $B=-0.4$ T. Ο λόγος που αριθμός Skyrmion κατά την παρουσία του σκυρμιονίου δεν εμφανίζει τιμές κοντά στο 1, ενδεχομένως να οφείλεται στο ότι η μαγνήτιση δεν έχει αντιστραφεί πλήρως στις πλευρές του τετραγώνου πέρα από το αριθμητικό σφάλμα. Γι' αυτό στην αρχή όπως δείχνει και η εικόνα 36, ξεκινάει με τιμές ~ 0.6 και όσο σταθεροποιείται φτάνει μέχρι και την τιμή $S=0.85$. Όσο αυξάνεται το πεδίο κατά μέτρο, ελαττώνεται η διάμετρος του σκυρμιονίου μέχρι που εξαφανίζεται όταν επιβάλλεται πεδίο $B=-1.3$ T. Αυτό σημαίνει ότι μπορεί να σχηματιστεί

σκυρμιόνιο και να διατηρηθεί για τιμές πεδίου μεταξύ (-0.4 T, -1.3 T). Η παρουσία του πεδίου, των αλληλεπιδράσεων DMI, της ενέργειας ανταλλαγής (εν απουσία της ανισοτροπίας) συμβάλλουν στην δημιουργία ενός Néel σκυρμιονίου σε ένα νανοσωματίδιο με τις δεδομένες διαστάσεις και θερμοκρασία.

Συνεχίζουμε με την γεωμετρία Corner, η οποία προκύπτει από την αφαίρεση ενός μικρό κομματιού σε σχήμα κύβου (με διαστάσεις $30 \times 30 \times 40 \text{ nm}^3$) από το πρωταρχικό ολόκληρο σχέδιο. Επομένως ο συνολικός όγκος του νανοσωματιδίου έχει ελαττωθεί. Στόχος όλων των γεωμετριών αυτής της εργασίας είναι η παρατήρηση της επίδρασης που μπορεί να έχει ένα σχήμα σε συνδυασμό με όλους τους υπόλοιπους παράγοντες στην διατήρηση των σκυρμιονίων.

Παρατηρώντας την εξέλιξη της διαμόρφωσης των μαγνητικών ροπών στο συγκεκριμένο σχήμα, μπορούμε εύλογα να διαπιστώσουμε ότι η περίπτωση της μικρής γωνίας στο σχήμα δεν επηρεάζει δραστικά το τρόπο που αντιστρέφεται η μαγνήτιση. Πιο αναλυτικά, παρουσιάζει πολλές ομοιότητες με την ολόκληρη γεωμετρία. Η εμφάνιση των λευκών περιοχών υφίσταται πάλι μεταξύ 0.6-0.83 T και από εκεί και πέρα ξεκινά η εξάπλωση. Όταν το πεδίο έχει τιμή 0.5 T αρχίζει αμυδρά να φαίνεται η ίδια αχαρακτήριστη διαμόρφωση σε σχήμα X. Η μόνη ιδιαιτερότητα είναι ότι η ύπαρξη της εσοχής άνω δεξιά, επηρεάζει το σχήμα της αρχικής διαμόρφωσης και των αμέσως επόμενων. Ωστόσο δεν εμφανίζεται μεγάλη διαφορά στις τιμές των αριθμών S. Στο μηδενικό μαγνητικό πεδίο ο αριθμός Skymion S εμφανίζει πάλι την ελάχιστη τιμή και είναι σχετικά κοντά με τον αντίστοιχο της ολόκληρης γεωμετρίας. Μετά από αυτό ακολουθεί ο σχηματισμός του αναμενόμενου stripe και στο πεδίο $B = -0.4 \text{ T}$ εμφανίζεται πάλι ένα Néel σκυρμιόνιο. Το skymion θα διατηρηθεί πάλι μέχρι την τιμή $B = -1.3 \text{ T}$, ελαττώνοντας την διάμετρο του και αυξάνοντας τον αριθμό S όσο αυξάνεται και το πεδίο κατά μέτρο. Επομένως, ένα νανοσωματίδιο με την συγκεκριμένη γεωμετρία, εμφανίζει σχεδόν την ίδια συμπεριφορά με την ολόκληρη τετραγωνική έχοντας το πλεονέκτημα ότι πάλι μπορεί να σχηματίσει το επιθυμητό σκυρμιόνιο.

Η γεωμετρία που αντιπροσωπεύει έναν σταυρό σημειώνει ελαφρώς διαφορετικά αποτελέσματα και αυτό ισχύει για όλα τα υλικά που μελετήσαμε. Η ύπαρξη 4 εσοχών, σε συμμετρικές θέσεις, οδηγεί σε μια γεωμετρία με συγκριτικά περιορισμένο όγκο και είναι αναμενόμενο ότι θα επηρεάζει τα αποτελέσματα μας.

Οι λευκές περιοχές ξεκινούν να εμφανίζονται ως συνήθως σε 0.6 T πεδίο και από εκεί και πέρα αρχίζει η είσοδος των μπλε περιοχών οι οποίες υποδηλώνουν τις ροπές που είναι αντίρροπες με το θετικό μαγνητικό πεδίο. Στα 0.2 T, εμφανίζεται μια διαμόρφωση σε σχήμα

αστεριού, καθώς η παρουσία των εσοχών εμποδίζει τον προηγούμενο σχηματισμό σε σχήμα «X». Στη συνέχεια θα προκύψει ένα πλάγιο «H» το οποίο θα μετατραπεί σε μια διαμόρφωση μορφής πλάγιου stripe, το οποίο θα σηματοδοτήσει πάλι την δημιουργία Néel σκυρμιονίου. Όταν το πεδίο μηδενίζεται, η διαμόρφωση που σχηματίζεται μοιάζει πολύ με skyrmionium το οποίο έχει αριθμό $S=0.16$. Είναι πολύ ενδιαφέρον καθώς αν απομακρύνουμε το νανοσωματίδιο από ένα εξωτερικό ομογενές πεδίο, από μόνο του σχηματίζει μια πιο περίπλοκη δομή σε σχέση με την ολόκληρη και την corner γεωμετρία. Το σκυρμιόνιο εμφανίζεται σε πεδίο $B=-0.34$ T και έκτοτε σημειώνει ελάττωση της διαμέτρου και αύξηση του αριθμού S με την ενίσχυση του πεδίου. Ο εξαφανισμός του πραγματοποιείται στο $B=-1.29$ T.

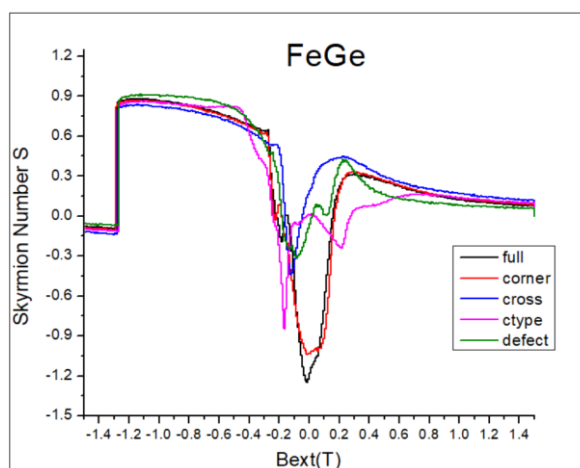
Η επόμενη γεωμετρία είναι η C-type, όπου έχουμε αποβάλλει ένα κύβο από το μέσο της δεξιάς πλευράς. Η μεγάλη αυτή εσοχή θα αποτελέσει το κέντρο όπου θα εμφανιστούν οι μπλε περιοχές και με αυτόν τον τρόπο θα επηρεάσει εξολοκλήρου τις διάφορες μορφές που θα λάβει η μαγνήτιση του υλικού.

Η δημιουργία της εσοχής, οδηγεί στην παρουσίαση των μπλε περιοχών όταν το πεδίο έχει τιμή 0.5T. Από εκεί και πέρα, η νέα διαμόρφωση εμφανίζει μορφή C και περιβάλλει την εσοχή. Όταν το πεδίο μηδενίζεται, το νανοσωματίδιο έχει την δυνατότητα να σχηματίσει ένα stripe πεπλατυσμένο που είναι σε σχήμα "C". Με την αντιστροφή του πεδίου και την αύξηση του μέτρου του το stripe συρρικνώνεται και σχηματίζει ένα πρωτεύον Néel σκυρμιόνιο όταν είναι $B=-0.5$ T. Ως συνήθως, διατηρείται όσο αυξάνεται το πεδίο μέχρι το -1.27 T όπου καταστρέφεται. Ωστόσο η τοποθεσία του δεν είναι στο κέντρο του νανοσωματιδίου εξαιτίας της παρέμβασης της εσοχής. Από ότι φαίνεται το κενό στην δεξιά πλευρά απωθεί το σκυρμιόνιο πιο αριστερά, αλλά δεν επηρεάζει τόσο πολύ την διατήρηση του σε σχέση με τις άλλες γεωμετρίες (αφού μπορεί να σχηματιστεί μεταξύ $(-0.4, -1.27)$ T.

Το τελευταίο είδος γεωμετρίας αυτής της εργασίας έχει την μοναδική ιδιαιτερότητα ότι παρουσιάζει μια ατέλεια που υποδηλώνει τον κενό χώρο στο εσωτερικό του νανοσωματιδίου. Επιλέχθηκε να έχει ακανόνιστο σχήμα και να βρίσκεται σε θέση έτσι ώστε να διαταράσσεται όσο το δυνατόν περισσότερο η συμμετρία και των τριών υλικών. Ως γνωστόν κάθε υλικό στην φύση και μετά από οποιαδήποτε κατεργασία εμφανίζει διάφορες μορφές διαταραχών (πχ κενές ατομικές θέσεις στο πλέγμα, προσμίξεις κλπ). Γι' αυτό στοχεύουμε να δούμε στην κλίμακα των νανομέτρων πόσο μπορεί να επηρεάσει μια ατέλεια τον σχηματισμό και την διατήρηση των σκυρμιονίων.

Η παρουσία της συγκεκριμένης ατέλειας μπορεί να επηρεάζει τον τρόπο που πραγματοποιείται η αντιστροφή της μαγνήτισης συνολικά, αλλά οδηγεί και πάλι στην δημιουργία ενός Néel σκυρμιονίου. Γνωρίζουμε ότι οι ροπές που αντιπροσωπεύουν τις περιοχές με μπλε χρώμα σχηματίζουν γωνία με το θετικό επιβαλλόμενο πεδίο $90^\circ < \phi \leq 180^\circ$. Η εμφάνιση τους ξεκινά όπως και στις προηγούμενες γεωμετρίες από τον κενό χώρο που δημιουργείται στην εν λόγω περίπτωση από την ατέλεια. Με την περαιτέρω ελάττωση του πεδίου μέχρι την αντιστροφή του στην $-z$ κατεύθυνση, οι μπλε περιοχές επεκτείνονται ραγδαία, καλύπτοντας τις παραμένουσες κόκκινες περιοχές. Μετά την αντιστροφή του, σχηματίζεται μια διαμόρφωση σχήματος “C” η οποία θα μετατραπεί σε stripe και αυτή θα οδηγήσει στην δημιουργία του σκυρμιονίου. Η ατέλεια οφείλεται για την τοποθέτηση του πυρήνα του σκυρμιονίου πιο δεξιά από το κέντρο του νανοσωματιδίου όπως γίνεται σε όλες τις γεωμετρίες πλην του C-type. Το σκυρμιόνιο μπορεί να διατηρηθεί για πεδία $(-0.4, -1.27)$ T.

Οι παραπάνω παρατηρήσεις μπορούν να αποτυπωθούν και σε ένα συνολικό διάγραμμα το οποίο θα προβάλλει το τρόπο που μεταβάλλεται ο αριθμός Skyrmion S για κάθε γεωμετρία ξεχωριστά (εικόνα 37). Το θετικό αυτών των γραφικών παραστάσεων είναι ότι η μελέτη τους μπορεί να προσφέρει χρήσιμα δεδομένα χωρίς να χρειαστεί να δούμε τα οπτικά αποτελέσματα των προσομοιώσεων.



Εικόνα 3715 Σχηματική αναπαράσταση της μεταβολής του αριθμού Skyrmion σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο για όλες τις γεωμετρίες του FeGe

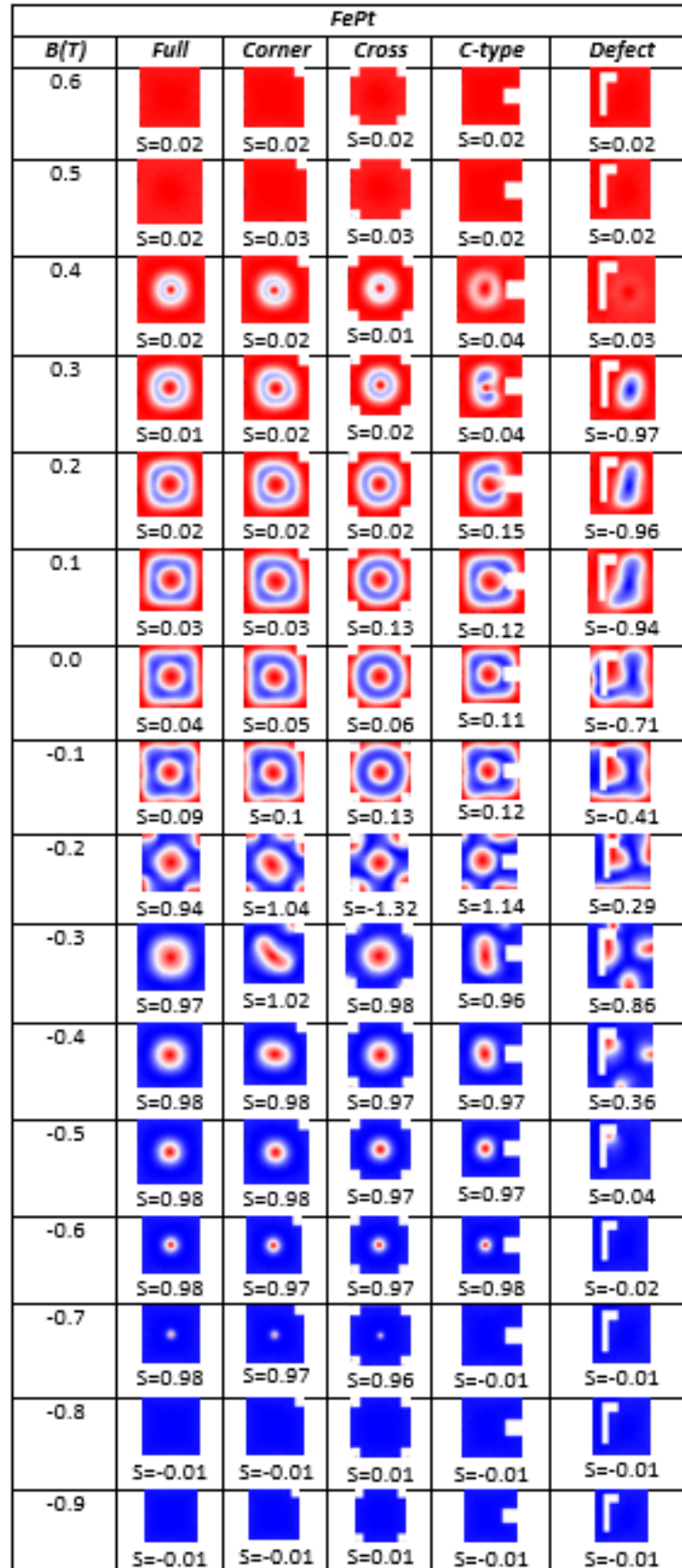
Οι εν λόγω γραφικές παραστάσεις εμφανίζουν σχετικά μεγάλες ομοιότητες μεταξύ τους, παρόλο που έχουμε τροποποιήσει την γεωμετρία σε κάθε μία. Ξεκινώντας από την αρχική τιμή πεδίου ($B=1.5$ T), όλα τα διαφορετικά σώματα επιδεικνύουν την ίδια συμπεριφορά και ο αριθμός σκύρμιον κυμαίνεται μεταξύ των τιμών $(-0.1, 0, 1)$. Η ελάττωση του θετικού πεδίου δείχνει να αυξάνει τον αριθμό S μέχρι που σχηματίζεται μια μικρή κορυφή περίπου στο 0.23 T σε όλες τις γεωμετρίες πέρα από την C-type, η οποία δείχνει να φθίνει.

Στην συνέχεια όλες οι γεωμετρικές εμφανίζουν μια σχετικά μικρή πτώση κοντά στην αρχή των αξόνων πέρα από την ολόκληρη και την corner οι οποίες σημειώνουν απότομη πτώση σε πολύ χαμηλές τιμές S. Όπως θα παρατηρήσουμε και από την εικόνα για τις δύο αυτές γεωμετρίες οι σκυρμιονικοί αριθμοί ταυτίζονται πολύ καθ' όλη τη διάρκεια των προσομοιώσεων, το οποίο μας δείχνει ότι η μικρή αφαίρεση ενός τμήματος από ολόκληρη την γεωμετρία δεν επιδρά πολύ στον αριθμό σκύρμιον. Έπειτα με την αντιστροφή του πεδίου οι παραστάσεις σημειώνουν αυξημένες τιμές, όπου κατά την προσέγγιση του πεδίου $B=-0.4T$, σταθεροποιείται κοντά στο 0.8, όπου δηλώνεται η δημιουργία και η σταθεροποίηση ενός σκυρμιονίου. Η απότομη πτώση στο $-1.2T$ δείχνει τον εξαφανισμό του σκυρμιονίου σε κάθε νανοσωματίδιο. Επομένως καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η χρήση FeGe μπορεί να συνεισφέρει στην δημιουργία σκυρμιονίων κάτω από συγκεκριμένες τιμές πεδίου και γεωμετριών.

4.3) FePt

Ύστερα από την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων που μας πρόσφεραν οι προσομοιώσεις πάνω στο κράμα FeGe, κατανοήσαμε ότι ο ανταγωνισμός ορισμένων ενεργειακών παραγόντων μπορούν να συμβάλλουν στην διατήρηση μαγνητικών σκυρμιονίων σε διαφορετικές γεωμετρίες. Πέρα από το συγκεκριμένο υλικό, ένα ακόμα προηγμένο είδος κράματος έχει ενδιαφέρουσες ιδιότητες και διαθέτει μεγάλες προοπτικές για εφαρμογή σε αποθηκευτικά μέσα αν αξιοποιηθεί σωστά. Πρόκειται για το κράμα σιδήρου – πλατίνας (FePt) του οποίου τα αποτελέσματα προβάλλονται στην εικόνα 38.

Το παρόν υλικό, λόγω των διαφορετικών παραμέτρων (μαγνήτιση κορεσμού κλπ), την ύπαρξη μαγνητοκρυσταλλικής ανισοτροπίας και την απουσία των αλληλεπιδράσεων DMI, αναμένεται να εμφανίζει εντελώς διαφορετικά αποτελέσματα συγκριτικά με το FeGe για όλες τις γεωμετρίες που εφαρμόστηκαν. Οι διάφορες τροποποιήσεις είναι παρόμοιες και σε αυτό το κράμα, έχοντας τοποθετημένη την μαγνήτιση στην διαγώνιο των τριών αξόνων. Αυτό έχει ως συνέπεια με την επιβολή του μαγνητικού πεδίου να προσπαθεί να προσανατολιστεί προς τον θετικό άξονα z. Ξεκινώντας με την ολόκληρη γεωμετρία, παρατηρούμε ότι σε υψηλές θετικές τιμές του πεδίου, δεν εμφανίζεται σύντομα κάποια περίεργη διαμόρφωση, μέχρι τα $0.32T$. Σε αυτή την τιμή εμφανίζεται ένας δακτύλιος μπλε χρώματος που περιβάλλει έναν πυρήνα κόκκινου χρώματος. Αυτή η μικρομαγνητική διαμόρφωση ονομάζεται Skyrmionium και στην ουσία πρόκειται για δύο διαφορετικά σκυρμιόνια με αντίθετο προσανατολισμό μεταξύ τους όπου το ένα βρίσκεται μέσα στο άλλο. Ο αριθμός S λαμβάνει τιμές κοντινές του 0, διότι αλληλοαναιρούνται οι αντίστοιχοι αριθμοί των μικρότερων σκυρμιονίων.



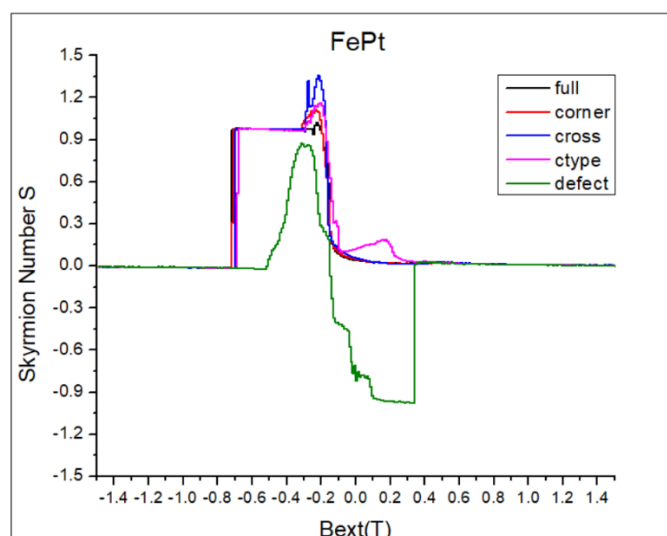
Εικόνα 38 Εξέλιξη της μαγνήτισης με την μεταβολή του εξωτερικού πεδίου για όλες τις γεωμετρίες του FePt και αναγραφή του αριθμού Skyrmion σε κάθε βήμα.

Η περαιτέρω ελάττωση του μέτρου του μαγνητικού πεδίου οδηγεί στην επέκταση του εξωτερικού σκυρμιονίου στο χώρο του νανοσωματιδίου. Η αύξηση των μπλε περιοχών συνεχίζεται και μετά την αντιστροφή του πεδίου, διατηρώντας και τον εσωτερικό σκυρμιόνιο που συνιστά τον πυρήνα. Σε μηδενικό πεδίο, το skyrmionium έχει αυξηθεί αρκετά και συνεχίζοντας να αυξάνουμε το πεδίο από την αντίθετη κατεύθυνση, ο μπλε δακτύλιος έχει καταλάβει το μεγαλύτερο όγκο του σωματιδίου, παραμένοντας μόνο ο κόκκινος πυρήνας. Το σημείο αυτό σηματοδοτεί την γέννηση του Néel σκυρμιονίου με πεδίο $B = -0.26$ T. Από εκεί και πέρα, η διάμετρος του δεν αυξάνεται όπως συνέβαινε στο εσωτερικό του skyrmionium, καθώς μειώνεται όσο ενισχύουμε το πεδίο. Όταν φτάσουμε στο -0.72 T έχει υπερβολικά μικρή διάμετρο που δεν μπορεί να σταθεροποιηθεί και καταστρέφεται.

Οι επόμενες 3 γεωμετρίες -πλην αυτής με την εσωτερική ατέλεια- παρά την απομάκρυνση κομματιών από την ολόκληρη γεωμετρία, εμφανίζουν σχεδόν τα ίδια αποτελέσματα με αυτήν, όπως συνέβη και στο κράμα FeGe. Η περιγραφή των αποτελεσμάτων που θα ακολουθήσει θα περιλαμβάνει την corner, cross και ctype γεωμετρία του κράματος FePt.

Η γεωμετρία με την άνω δεξιά εσοχή, επιτρέπει και αυτή την δημιουργία ενός Skyrmionium το οποίο δεν δείχνει να επηρεάζεται από την συγκριτικά μικρότερο χώρο που έχει το νανοσωματίδιο. Όσο εξελίσσεται η προσομοίωση, οι μπλε περιοχές επεκτείνονται στον χώρο και μετά την αντιστροφή του πεδίου, εμφανίζεται το Néel σκυρμιόνιο όταν εφαρμόζεται $B = -0.26$ T. Η διάμετρος του ελαττώνεται όσο αυξάνουμε το πεδίο μέχρι που εξαφανίζεται πλήρως στο $B = -0.72$ T. Η γεωμετρία με σχήμα σταυρού επιδεικνύει πιο δύσκολη αντιστροφή λόγω του περιορισμένου όγκου. Οι 4 συμμετρικές εσοχές κεντρίζουν τις μπλε περιοχές μέχρι τον εξαφανισμό του skyrmionium και την δημιουργία του σκυρμιονίου στο κέντρο της άνω επιφάνειας λόγω των θέσεων και διάστασεων που έχουν οι εσοχές. Το σκυρμιόνιο διατηρείται σε παρόμοιο πεδίο τιμών ($-0.33, -0.7$) T. Τέλος, η γεωμετρία σε σχήμα C, εμφανίζει μικρές διαφορές γιατί η εσοχή βρίσκεται στο μέσο της πλευράς του και έχει διαφορετικές διαστάσεις. Αρχικά πριν δημιουργηθεί το skyrmionium, προηγείται ο σχηματισμός μιας διαμόρφωσης τύπου C η οποία με αργό ρυθμό αποκτά μια κλειστότητα. Η αντιστροφή σε όλο το χώρο συνεχίζεται, μέχρι που προκύπτει το αναμενόμενο Néel σκυρμιόνιο και αυτό διατηρείται όσο το πεδίο κυμαίνεται μεταξύ των τιμών ($-0.41, -0.69$) T. Για ακόμη μία φορά παρατηρούμε ότι η κατασκευή ενός σκυρμιονίου πραγματοποιείται εφόσον το πεδίο έχει αρνητική κατεύθυνση και αυξηθεί το μέτρο του μέσα στα πλαίσια που έχουμε ορίσει.

Η τοποθέτηση της εσωτερικής ατέλειας στο κράμα FePt όπως θα παρατηρήσουμε και παρακάτω διαταράσσει εντελώς την συμπεριφορά του υλικού σε σχέση με τις προηγούμενες γεωμετρίες. Θα περιμέναμε αποτελέσματα όπως εμφάνισε το FeGe συγκριτικά με τις άλλες γεωμετρίες του. Αντιθέτως το κράμα FePt δεν μπορεί να συνεισφέρει στην διατήρηση παρόμοιου σκυρμιονίου κατά την παρουσία της συγκεκριμένης ατέλειας. Πιο αναλυτικά, η ελάττωση του πεδίο στα $B=0.34$ T δεν οδηγεί στον σχηματισμό ενός Skyrmionium, αλλά στην αμέσως δημιουργία ενός Νέελ σκυρμιονίου με αντίθετη συμμετρία και κατεύθυνση από τα υπόλοιπα που έχουμε παρατηρήσει. Ωστόσο όταν το πεδίο έχει τιμή $B=0.25$ T, μετατρέπεται σε stripe και επεκτείνεται σε ολόκληρο τον χώρο. Κατά τον μηδενισμό του πεδίου, η διαμόρφωση τείνει να σχηματίσει έναν δακτύλιο, αλλά η θέση στην οποία βρίσκεται η ατέλεια το εμποδίζει. Η αντιστροφή του πεδίου συμβάλλει στην εξάπλωση της διαμόρφωσης σε όλο τον χώρο, χωρίς να διατηρείται κάποιο σκυρμιόνιο, παρά μόνο στις πλευρές. Επομένως, η γεωμετρία αυτή, δεν μπορεί να αποτελέσει παράδειγμα για την διατήρηση σκυρμιονίων παρά μόνο για ένα πολύ μικρό πεδίο τιμών (0.25, 0.34) T. Παρακάτω στην εικόνα 39 δίνεται η πλήρη αναπαράσταση των γραφικών παραστάσεων του αριθμού σκύρμιον για όλες τις γεωμετρίες.



Εικόνα 39 Σχηματική αναπαράσταση της μεταβολής του αριθμού Skyrmion σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο για όλες τις γεωμετρίες του FePt.

















































































Όπως είδαμε και στην περίπτωση του κράματος FeGe, όλες οι γραφικές παραστάσεις και σε αυτήν την περίπτωση έχουν παρόμοια συμπεριφορά αν εξαιρέσουμε την αντίστοιχη της γεωμετρίας με την ατέλεια. Όλες εμφανίζουν μηδενικές τιμές σε υψηλά θετικά πεδία όπου έχουμε τον αργό σχηματισμό του δακτυλίου (Skyrmionium) και παραμένουν σταθερές μέχρι τις τιμές (-0.1, -0.2) T. Σε αυτό το πεδίο τιμών οι μπλε περιοχές έχουν επεκταθεί σε τόσο μεγάλο βαθμό, που έχει διατηρηθεί ο προηγούμενος πυρήνας του Skyrmionium και αποτελεί

το νέο Néel σκυρμιονιο. Παρατηρούμε ότι όσο αφαιρούμε τμήματα από το υλικό, τόσο πιο υψηλή θα είναι η κορυφή που σχηματίζει η γραφική παράσταση στα $-0.2T$, εκτός από την περίπτωση της ατέλειας, με κυρίαρχη την γεωμετρία με τον σταυρό. Έπειτα σταθεροποιείται για ένα μικρό διάστημα σε τιμές κοντινές του 1.0 που υποδηλώνει την σταθεροποίηση του σκυρμιονίου. Τέλος η εξαφάνιση του δηλώνεται με την απότομη πτώση τους στο μηδέν. Η περίπτωση της ατέλειας διαφοροποιείται αρκετά σε σχέση με τις άλλες, καθώς μετά την αρχική σταθεροποίηση στις μηδενικές τιμές, σημειώνεται μεγάλη πτώση σε θετικά πεδία που οδηγεί στο σχηματισμό ενός αντίστροφου Néel σκυρμιονίου. Ωστόσο δεν διατηρείται για μεγάλο εύρος τιμών με αποτέλεσμα η μείωση του πεδίου και η ακόλουθη αντιστροφή να οδηγεί σε αλλόκοτες διαμορφώσεις. Τέλος η γραφική παράσταση διατηρείται στο μηδέν μαζί με τις υπόλοιπες. Επομένως ένα νανοσωματίδιο από FePt μπορεί να δημιουργήσει σκυρμιόνια, αλλά σε μικρότερο εύρος πεδίων και με μεγαλύτερη διάμετρο σε σχέση με το FeGe.

4.4) CoPd

Το τελευταίο υλικό που μελετήθηκε, είναι το κράμα Κοβαλτίου-Παλλαδίου. Η τροποποίηση του κώδικα που επιτρέπει την ομαλή διεκπεραίωση των προσομοιώσεων πάνω στις διάφορες γεωμετρίες, έγκειται στο διαφορετικό βήμα που εφαρμόστηκε για το εξωτερικό πεδίο. Σε αντίθεση με τα υπόλοιπα δύο κράματα, το μαγνητικό πεδίο μεταβάλλεται κατά $0.05 T$ και έπειτα από κάθε βήμα υπολογίζεται η μαγνήτιση και οι πυκνότητες των διαφόρων ενεργειών. Τα οπτικά και γραφικά αποτελέσματα (εικόνα 40 και 41 αντίστοιχα) που λάβαμε διαφέρουν από τα άλλα υλικά, αλλά μεταξύ των γεωμετριών στο ίδιο υλικό εμφανίζουν ομοιότητες πέρα από τη περίπτωση με την ατέλεια.

Αρχικά, ξεκινάμε ως συνήθως με την ολόκληρη γεωμετρία κατά την οποία η αισθητή παρατήρηση της αντιστροφής της μαγνήτισης γίνεται κατά τα $0.5 T$ όταν δηλαδή κάνουν την εμφάνιση τους οι λευκές περιοχές της μηδενικής μαγνήτισης. Η μετέπειτα αντιστροφή και η εμφάνιση των μπλε περιοχών υφίσταται κατά τα $0.3 T$, οι οποίες υποδεικνύουν τις μαγνητικές ροπές που διαγράφουν γωνία $90^\circ < \phi \leq 180^\circ$ σε σχέση με το θετικό επιβαλλόμενο πεδίο. Αυτές οι περιοχές θα συνεχίσουν να επεκτείνονται και θα σχηματίζουν διαμορφώσεις με περίεργα σχήματα. Από τα $0.2 T$ οι μπλε περιοχές σημειώνουν μια φαινομενική περιστροφή που μοιάζει με ελικοειδή μορφή και μέχρι και στο μηδενικό πεδίο έχουν αυξηθεί κατά όγκο. Η αντιστροφή ευνοεί ακόμα περισσότερο την στοίχιση των ροπών προς την ίδια κατεύθυνση με αποτέλεσμα να ενισχύονται οι μπλε περιοχές σε βάρος των κόκκινων, εκτός από το κέντρο όπου θα

CoPd					
$B(T)$	Full	Corner	Cross	C-type	Defect
0.6	 S=0.09	 S=0.1	 S=0.1	 S=0.08	 S=0.04
0.5	 S=0.1	 S=0.1	 S=0.12	 S=0.07	 S=0.03
0.4	 S=0.12	 S=0.12	 S=0.12	 S=-0.24	 S=-0.15
0.3	 S=-0.28	 S=-0.26	 S=-0.1	 S=-0.9	 S=-0.78
0.2	 S=-1.6	 S=-1.62	 S=-1.53	 S=-1.32	 S=-1.34
0.1	 S=-2.19	 S=-2.35	 S=-2.43	 S=-1.52	 S=-1.42
0.0	 S=-1.86	 S=-1.89	 S=-1.96	 S=-1.54	 S=-1.29
-0.1	 S=-1.75	 S=-1.78	 S=-1.8	 S=-1.22	 S=-0.59
-0.2	 S=-1.77	 S=-1.59	 S=-1.57	 S=-0.15	 S=0.72
-0.3	 S=-0.34	 S=-0.57	 S=-0.81	 S=0.34	 S=0.96
-0.4	 S=0.59	 S=0.88	 S=0.84	 S=0.87	 S=1.39
-0.5	 S=0.88	 S=0.88	 S=0.86	 S=0.87	 S=1.86
-0.6	 S=0.9	 S=0.89	 S=0.88	 S=0.9	 S=1.94
-0.7	 S=0.91	 S=0.9	 S=0.89	 S=0.91	 S=1.95
-0.8	 S=0.92	 S=0.92	 S=0.9	 S=0.91	 S=1.95
-0.9	 S=0.93	 S=0.92	 S=0.9	 S=0.93	 S=1.96

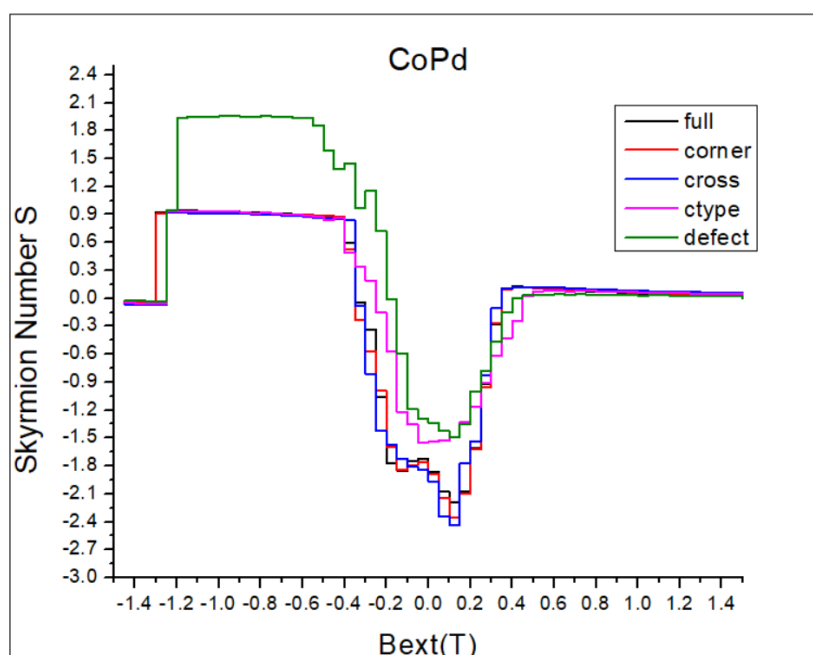
Εικόνα 40 Εξέλιξη της μαγνήτισης με την μεταβολή του εξωτερικού πεδίου για όλες τις γεωμετρίες του CoPd και αναγραφή του αριθμού Skyrmion σε κάθε βήμα.

επικρατήσει κάποια διαμόρφωση. Η ομαλή αύξηση κατά μέτρο του μαγνητικού πεδίου στον $-z$ άξονα, θα οδηγήσει στην αύξηση της πυκνότητας των μπλε περιοχών οι οποίες στην συνέχεια θα οδηγήσουν στον σχηματισμό μια ακαθόριστης δομής σχήματος πλάγιου «H». Όσο συμβαίνει αυτό, ο αριθμός σκυρμιον S αυξάνεται, μέχρι που σταθεροποιείται σε τιμές κοντινές του $S=0.90$ όταν δημιουργείται ένα stripe. Αυτό στην συνέχεια θα μετατραπεί σε Néel skyrmion που μπορεί να διατηρηθεί για πεδία $(-0.85, -1.3)$ T.

Η εισαγωγή μιας εσοχής στην άνω δεξιά γωνία έχει επιλεχθεί και σε αυτό το υλικό για να διαταράξουμε έστω και λίγο την συμμετρία της ολόκληρης γεωμετρίας και να δούμε από αυτό πόσο επηρεάζεται η διαμόρφωση της μαγνήτισης. Δεν εντοπίζονται μεγάλες διαφορές με ολόκληρο το σώμα παρά μόνο το γεγονός ότι η εσοχή διευκολύνει την αντιστροφή στις περιοχές δίπλα της. Το Néel skyrmion διατηρείται για $(-0.8, -1.3)$ T. Η γεωμετρία σε σχήμα σταυρού παρόλο που εμφανίζει υψηλή συμμετρία και περιορισμένο όγκο, τα οπτικά αποτελέσματα δηλώνονται ίδια με τις προηγούμενες γεωμετρίες, καθώς οι εσοχές και εδώ αποτελούν τα κέντρα αντιστροφής της μαγνήτισης. Η διατήρηση του σκυρμιονίου γίνεται για πεδία $(-0.8, -1.25)$ T. Η c-type γεωμετρία εμφανίζει την αντιστροφή της για άλλη μια φορά από την εσοχή, αλλά δεν πραγματοποιείται μια φαινομενική ελικοειδή δομή όπως στις προηγούμενες. Περισσότερο σχηματίζεται μια αχαρακτήριστη διαμόρφωση που θα δώσει στην συνέχεια το αναμενόμενο πλάγιο «H», αυτό σε stripe και τέλος σε σκυρμιόνιο για $(-0.75, -1.25)$ T πεδία. Τέλος, το περίεργο σχήμα της ατέλειας διαταράσσει εντελώς την συμμετρία με συνέπεια να δίνει εντελώς διαφορετικά αποτελέσματα σε σχέση με όλα τα υλικά. Εμφανίζεται παρόμοια συμπεριφορά όσον αφορά τις μπλε περιοχές δεξιά της ατέλειας, μέχρι που όταν το πεδίο είναι $B=-0.5$ T, εμφανίζεται ήδη ένα σκυρμιόνιο χωρίς να έχει σταματήσει πλήρως η αντιστροφή. Δίπλα του εξελίσσεται μια διαμόρφωση σε μορφή stripe η οποία θα μας δώσει άλλο ένα σκυρμιόνιο για πεδίο $B=-0.8$ T. Όσο συμβαίνει αυτό, το αρχικό σκυρμιόνιο διαγράφει μια μικρή τροχιά προς τα κάτω, το οποίο δεν το έχουμε συναντήσει πουθενά αλλού. Τα δύο σκυρμιόνια συνυπάρχουν μεταξύ τους μέχρι τον εξαφανισμό του πρώτου στα $B=-1.2$ T και το δεύτερο διατηρείται μέχρι τα $B=-1.25$ T.

Παρακάτω παρατίθεται το τελικό διάγραμμα στο οποίο συνοψίζονται οι γραφικές παραστάσεις όλων των γεωμετριών. Θα παρατηρήσουμε ότι δεν εμφανίζουν την ίδια συνέχεια από την οποία χαρακτηρίζονται τα διαγράμματα των άλλων δύο κραμάτων. Αυτό οφείλεται στο μεγαλύτερο βήμα που εφαρμόσαμε στο πεδίο, με αποτέλεσμα να έχουμε πιο κλιμακωτές γραφικές παραστάσεις.

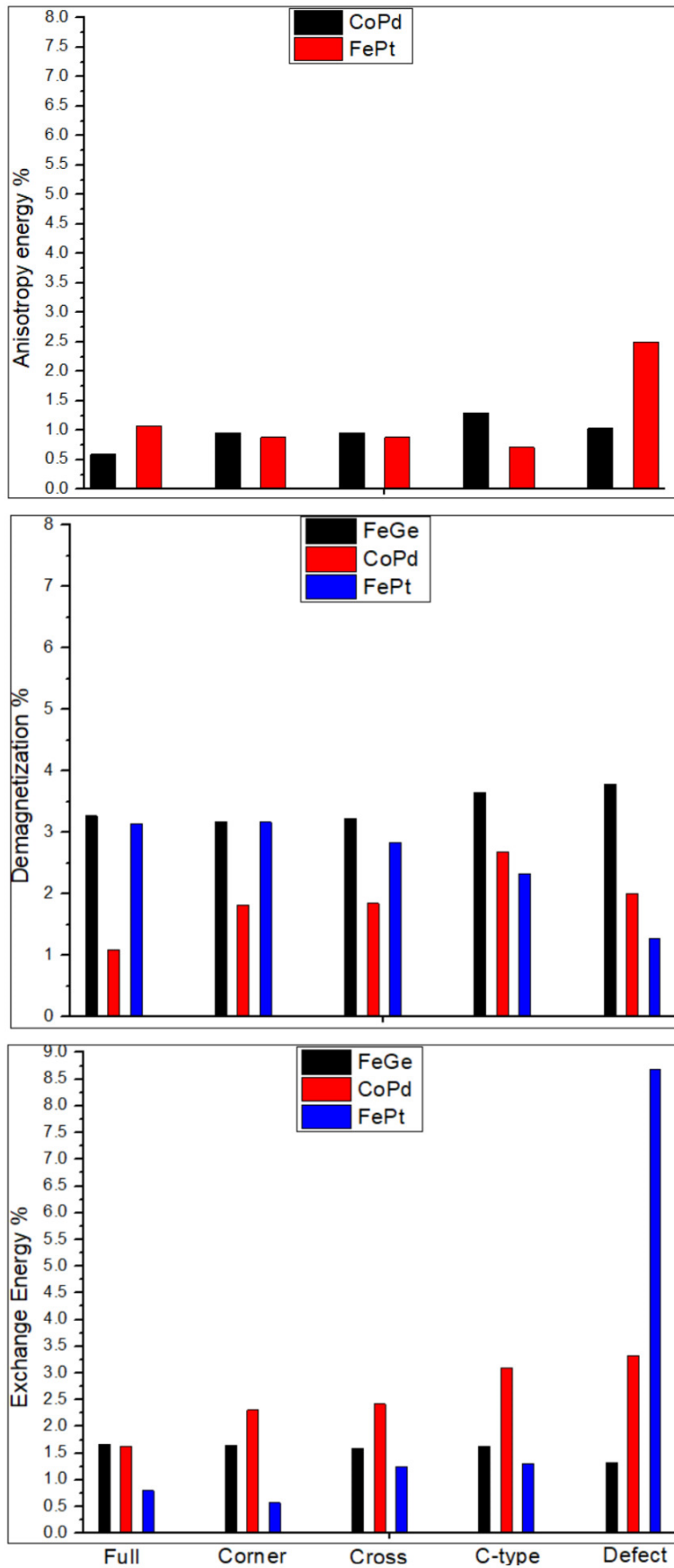
Κλασσικά όλες οι παραστάσεις στην αρχή ταυτίζονται σε μηδενικές τιμές, ώσπου η εμφάνιση των μπλε περιοχών να οδηγεί στην σταδιακή πτώση τους σε αρνητικές τιμές. Η αντιστροφή του πεδίου εξαναγκάζει τον αριθμό σκυρμιον να αυξηθεί και για αυτό οι γραφικές παραστάσεις προσεγγίζουν κλιμακωτά θετικές τιμές. Τα πεδία που αναφέραμε παραπάνω στα οποία διατηρούνται τα σκυρμιόνια αποδεικνύονται και στα διαγράμματα όπου οι καμπύλες σταθεροποιούνται γύρω από $S=0.9$. Εξαίρεση αποτελεί η φυσικά η γεωμετρία με την ατέλεια, όπου η καμπύλη σταθεροποιείται σε τιμές $S \sim 1.9$. Η περαιτέρω αύξηση του πεδίου οδηγεί στην πτώση στο 0, ενώ η defect γεωμετρία πρώτα οδηγείται σε $S=0.9$ λόγω της παρουσίας ενός σκυρμιονίου και μετά κατευθύνεται σε μηδενικές τιμές.



Εικόνα 41 Σχηματική αναπαράσταση της μεταβολής του αριθμού Skymion σε συνάρτηση με το εξωτερικό πεδίο για όλες τις γεωμετρίες του CoPd.

4.5) Σχετική μεταβολή των ενεργειών

Η διαδικασία της αντιστροφής της μαγνήτισης και του μετέπειτα σχηματισμού του σκυρμιονίου, χαρακτηρίζεται από πολλούς ενεργειακούς φραγμούς που πρέπει να υπερβεί το σύστημα προκειμένου να φτάσει στο επιθυμητό αποτέλεσμα. Αυτές οι μεταβάσεις της μαγνήτισης έχουν ως αίτιο τις θετικές ή αρνητικές μεταβολές των ενεργειών που αναφέραμε και σε συνδυασμό με την επιλεγμένη γεωμετρία και πεδίο ωθούν το σύστημα στις δομές που αναλύονται στις προηγούμενες εικόνες. Στην ουσία παρατηρούμε τις σχετικές μεταβολές των 3 σημαντικότερων ενεργειών την χρονική στιγμή που δημιουργείται σκυρμιόνιο σε κάθε υλικό, δηλαδή ποιο ενεργειακό κατώφλι πρέπει να ξεπεράσει το σύστημα για να επιτρέψει την διατήρηση του. Τα παρακάτω γραφήματα (εικόνα 42) βασίζονται στις απόλυτες τιμές των σχετικών μεταβολών των ενεργειών.



Εικόνα 42 Σχετικές μεταβολές των ενεργειών ανισοτροπίας, απομαγνήτισης και ανταλλαγής για τα 3 κράματα κατά τον σχηματισμό σκυρμιονίου,

Όπως γνωρίζουμε, η κάθε γεωμετρία των υλικών διαδραματίζει σημαντικό ρόλο αφού επηρεάζει την διαμόρφωση που θα σηματοδοτήσει στην συνέχεια την εμφάνιση του Néel σκυρμιονίου. Η πρώτη δομή που θα μετατραπεί σε σκυρμιόνιο έχει και αυτή μεγάλο μερίδιο ευθύνης για τις ενεργειακές μεταβολές. Για τα κράματα FeGe και CoPd, έχουμε μια αχαρακτήριστη δομή σχήματος «H» η οποία όσο αυξάνεται το πεδίο μετατρέπεται σε στενό stripe και αυτό στην συνέχεια δίνει το επιθυμητό Néel σκυρμιόνιο. Αντιθέτως, στο FePt προηγείται ένα τελείως διαφορετικό Skyrmionium. Οι λεπτομέρειες αυτές θα επηρεάσουν τις σχετικές μεταβολές σε κάθε κράμα όπως θα δούμε στις παρακάτω παραγράφους.

Ξεκινώντας με το κράμα FeGe, η ικανότητα του να δημιουργεί σκυρμιόνια προκύπτει από τον ανταγωνισμό όλων των παραπάνω ενεργειακών παραγόντων πέρα από την ανισοτροπία η οποία δεν υφίσταται. Η ενέργεια απομαγνήτισης όταν βρίσκεται στην κατάσταση του stripe, αυξάνεται κατά 3% με την παρουσία του Néel skyrmion, το οποίο παρατηρείται για όλες τις γεωμετρίες. Διαπιστώνουμε επίσης ότι η ελάττωση του όγκου στο νανοσωματίδιο, οδηγεί συγκριτικά σε μεγαλύτερη σχετική μεταβολή της. Από την άλλη, η σχετική μεταβολή της ενέργειας ανταλλαγής δεν μπορεί να συνεισφέρει αρκετά στην διαμόρφωση του σκυρμιονίου, διότι οι τιμές της κυμαίνονται στο 1.5% το οποίο είναι ένα πολύ μικρό ποσοστό για να θεωρηθεί καθοριστικό.

Το CoPd από την άλλη, εμφανίζει πέρα από τους υπόλοιπους ενεργειακού όρους και την εξάρτηση από την μεταβολή της ενέργειας ανισοτροπίας. Η αφαίρεση τμημάτων από το νανοσωματίδιο, δηλώνει αύξηση στην μεταβολή της ανισοτροπίας, ωστόσο δεν μπορεί να συνεισφέρει ολοκληρωτικά μιας και κυμαίνεται μεταξύ του 1%. Παρόμοια συμπεριφορά δείχνει η ενέργεια απομαγνήτισης, που αυξάνεται με την αλλαγή της γεωμετρίας και σημειώνει την μεγαλύτερη τιμή στην C-type. Η περίπτωση της ατέλειας, παρόλο που οδηγεί στον σχηματισμό 2 σκυρμιονίων, φαίνεται να χρειάζεται μικρότερη αύξηση της ενέργειας για την δημιουργία και διατήρηση τους. Τέλος η ενέργεια ανταλλαγής στο υλικό αυτό αυξάνει την τιμή της και από ότι φαίνεται τείνει να αυξηθεί περισσότερο όσο αλλάζουμε την γεωμετρία σύμφωνα με τα δεδομένα αυτής της εργασίας. Η c-type και η γεωμετρία με την ατέλεια εμφανίζουν την μεγαλύτερη αύξηση για το CoPd.

Το FePt, αποτελεί μια ενδιαφέρουσα περίπτωση καθώς οι σχετικές μεταβολές των ενεργειών απομαγνήτισης και ανταλλαγής είναι αντιστρόφως ανάλογες. Η ενέργεια ανταλλαγής μπορεί να μην επιδρά στο ολικό σχηματισμό του σκυρμιονίου διότι τα ποσοστά για τις 4 πρώτες γεωμετρίες είναι κάτω από 1%, ωστόσο δηλώνει αύξηση με την αλλαγή της γεωμετρίας. Η μετατροπή του Skyrmionium σε Néel σκυρμιόνιο έχει ως αποτέλεσμα να μην

εμφανίζονται πολλές διαφορές οι οποίες να μπορούν να επηρεάσουν την τάση των γειτονικών ροπών να αλληλοεπιδρούν μεταξύ τους. Στις ίδιες γεωμετρίες οι ενέργειες απομαγνήτισης δηλώνουν μείωση όσο ελαττώνουμε τον όγκο ωστόσο παραμένουν θετικές ενώ οι ενέργειες ανταλλαγής κατά μέτρο αυξάνονται ενώ οι μεταβολές είναι αρνητικές. Τέλος στην περίπτωση της ατέλειας, το σκυρμιόνιο εμφανίζεται πολύ νωρίς σε σχέση με τις υπόλοιπες προσομοιώσεις και ο πυρήνας έχει αντίστροφη κατεύθυνση με τα υπόλοιπα. Το γεγονός ότι δεν προηγείται κάποια διαμόρφωση, η ενέργεια ανταλλαγής ελαττώνεται ραγδαία και η απομαγνήτισης σημειώνει μικρή αύξηση. Παρακάτω παρατίθενται τα συνδυαστικά διαγράμματα στα οποία περιγράφεται η εξάρτηση όλων των σχετικών μεταβολών των ενεργειών και του αριθμού Skyrminion S από το εξωτερικό πεδίο.

4.6) Συνδυαστικά διαγράμματα

Τα επόμενα διαγράμματα εξειδικεύονται στην παρουσίαση του τρόπου που μεταβάλλεται η σχετική μεταβολή κάθε ενέργειας σε συνάρτηση με το επιβαλλόμενο πεδίο. Όλες οι απόλυτες τιμές των ποσοστών των σχετικών μεταβολών που εμφανίζονται καθ' όλη την διάρκεια κάθε προσομοίωσης, συνοδεύονται με την εξέλιξη του αριθμού skyrminion S κάθε γεωμετρίας. Με αυτόν τον τρόπο μπορούμε να κατανοήσουμε πότε συμβαίνουν οι μεγαλύτερες ποσοστιαίες μεταβολές, οι οποίες όπως και θα παρατηρήσουμε υφίσταται σε απότομες μεταβολές των διαφόρων διαμορφώσεων της μαγνήτισης και συνάμα του αριθμού S . Η περαιτέρω ανάλυση θα ακολουθήσει στις επόμενες παραγράφους.

4.6.1) Σχετικές μεταβολές ενεργειών FeGe

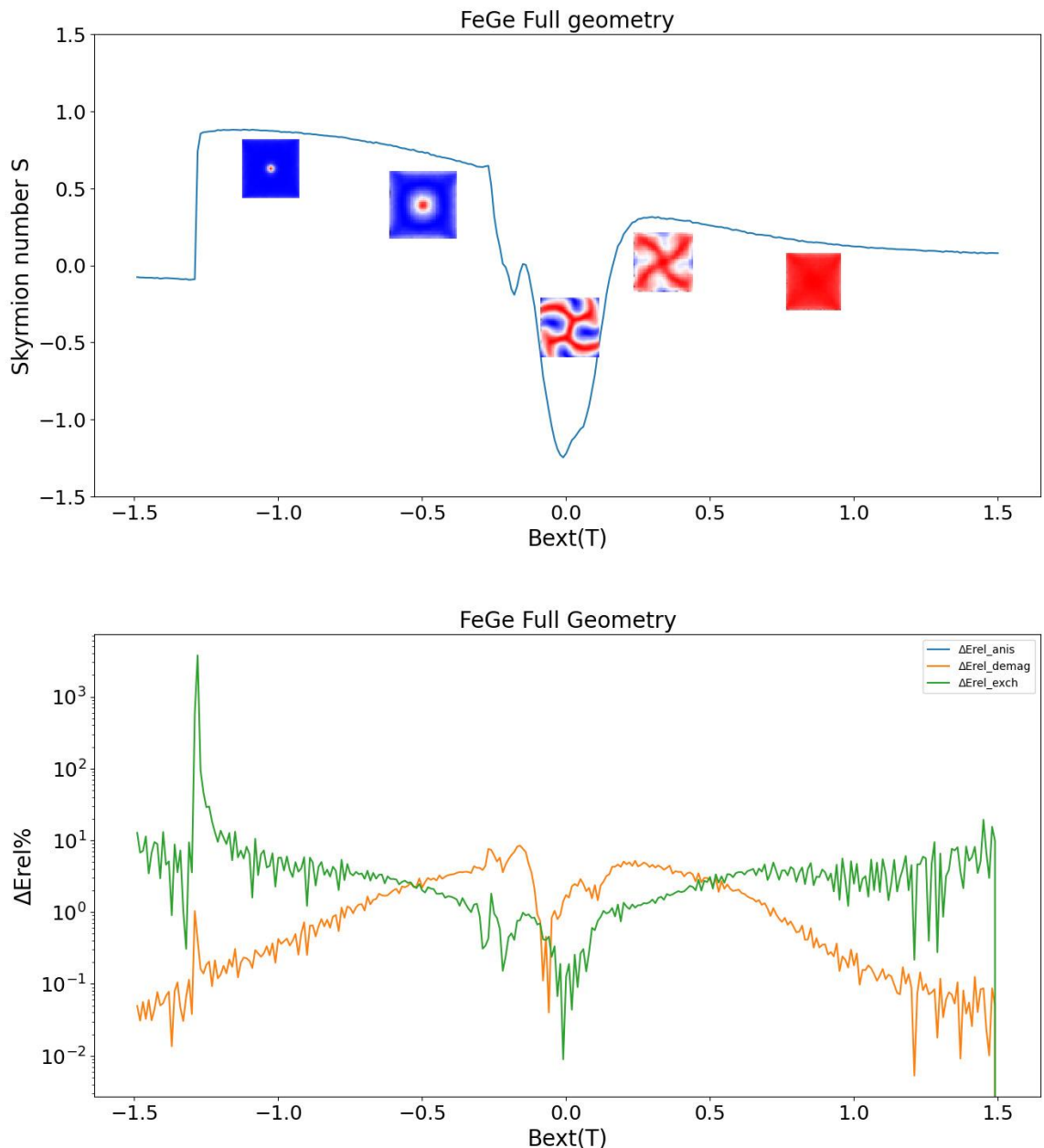
Ξεκινώντας από το κράμα του FeGe, αναμένουμε τις σχετικές μεταβολές της ενέργειας απομαγνήτισης και ανταλλαγής μετά από κάθε βήμα του πεδίου ($\delta B = 0.01T$). Η αρχική κατάσταση της ολόκληρης γεωμετρίας έχει ως αποτέλεσμα την επιβολή το κάθετου θετικού πεδίου $B = +1.5 T$. Από αυτήν στιγμή η ενέργεια ανταλλαγής εμφανίζει ελάττωση κατά 15%, το οποίο είναι και λογικό καθώς οι ροπές δεν έχουν προλάβει να σχηματίσουν δομές και είναι σχεδόν παράλληλες, ενώ η απομαγνήτισης αυξάνεται κατά ένα πολύ μικρό ποσοστό (0.08%). Από εκεί και πέρα, οι γραφικές παραστάσεις εμφανίζουν αυξομειώσεις που μέχρι τα 1.2 T έχουν μέση τιμή σταθερή. Η ελάττωση του πεδίου οδηγεί την μεταβολή της ενέργειας ανταλλαγής να έχει φθίνουσα συμπεριφορά, στα σημεία που εμφανίζονται οι ακαθόριστες δομές και οι σχετικές μεταβολές της απομαγνήτισης αντιθέτως αυξάνονται. Στα 0.47 T οι σχετικές μεταβολές ταυτίζονται στο 3%, όπου η ενέργεια απομαγνήτισης έχει αυξηθεί ενώ η ανταλλαγής συνεχίζει να ελαττώνεται. Το ενδιαφέρον έγκειται στο μηδενικό πεδίο, όπου και οι δύο ενέργειες εμφανίζουν μια απότομη πτώση στις μεταβολές τους. Σε αυτό το σημείο

γνωρίζουμε ότι ο αριθμός S έχει τιμές περίπου -1 , δηλαδή προσεγγίζει συμπεριφορά σκυρμιονίου. Οι ενέργειες σε αυτό το σημείο δεν μεταβάλλονται σχεδόν καθόλου σε σχέση με τις προηγούμενες τιμές τους (περίπου 0.09%), ωστόσο η αντιστροφή του πεδίου και η πρώτη κορυφή πριν το μηδενικό πεδίο θα αναγκάσει της ενέργειες να μεταβληθούν σε συγκριτικά μεγαλύτερο ποσοστό ($\Delta E_{rel_dema} = 8.165\%$ και $\Delta E_{rel_exch} = 1.05\%$). Οι αυξομειώσεις συνεχίζονται σε όλη την διάρκεια, για τις οποίες οφείλεται η παρουσία θερμοκρασίας. Η θερμική ενέργεια που αποθηκεύεται στο σύστημα οδηγεί στις πολύπλευρες διακυμάνσεις των σχετικών μεταβολών των ενεργειών, διαταράσσοντας την συνέχεια της συνάρτησης.

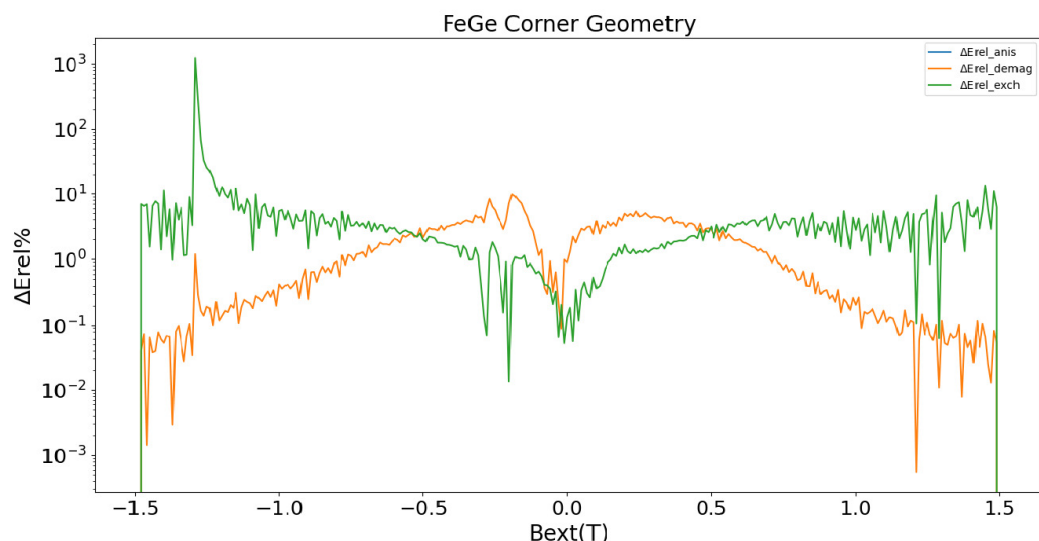
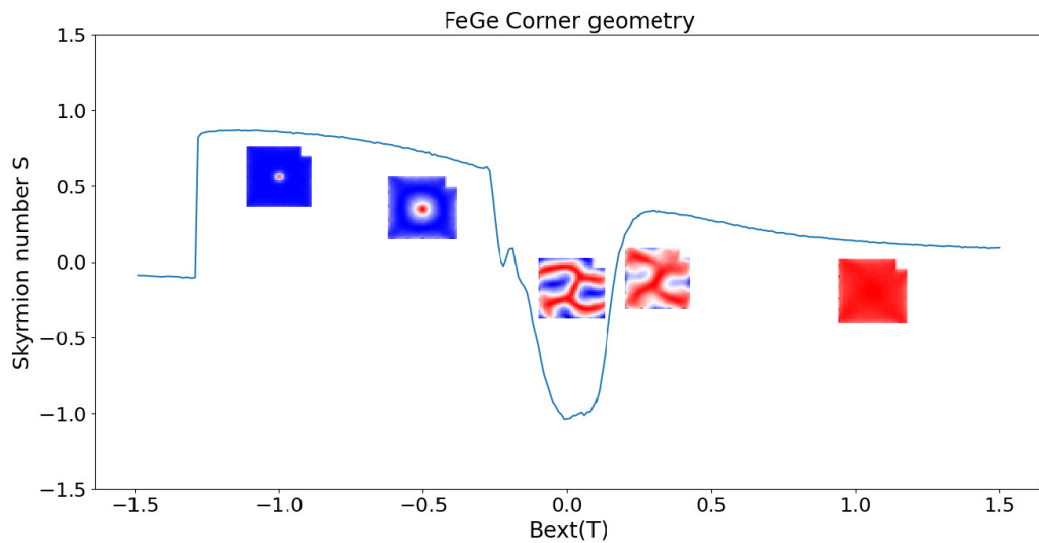
Η περαιτέρω αύξηση του αρνητικού πεδίου, οδηγεί στην σταδιακή αύξηση της μεταβολής της ενέργειας ανταλλαγής και στην μείωση της απομαγνήτισης. Από το πεδίο -0.3 T οι διακυμάνσεις κυμαίνονται γύρω από τις τιμές $1.5\%-3.8\%$ και $2.75\%-4.32\%$ μέχρι που προσεγγίζουμε την γέννηση του σκυρμιονίου στα -0.4 T. Από εκεί και πέρα οι ενέργειες ακολουθούν την ίδια πορεία, όπου η απομαγνήτιση παραμένει σε υπερβολικά μικρές μεταβολές όσο αυξάνεται το πεδίο, ενώ η ανταλλαγής αυξομειώνεται για ποσοστά κυρίως κάτω από 10% . Η καταστροφή του σκυρμιονίου στα -1.3 T προκαλεί μια υπερβολικά απότομη ελάττωση της ενέργειας ανταλλαγής, της τάξης των 3000% το οποίο υποδηλώνει την τεράστια μεταβολή που υφίσταται στην ενέργεια ανταλλαγής και η απομαγνήτισης παραμένει σε μικρά ποσοστά. Επομένως διαπιστώνουμε εύλογα ότι μεγαλύτερη επίδραση μεταξύ των δύο στο συγκεκριμένο υλικό και σε αυτή την γεωμετρία, διαθέτει η ενέργεια ανταλλαγής καθώς σε κάθε μετάβαση της μαγνήτισης εμφανίζει σχετικά μεγαλύτερες μεταβολές. Μπορούμε να υποστηρίξουμε ότι η ενέργεια ανταλλαγής ευθύνεται κατά ένα μεγάλο ποσοστό για τις διάφορες διαμορφώσεις που εξηγήσαμε παραπάνω στην συγκεκριμένη γεωμετρία.

Η γεωμετρία της άνω δεξιά εσοχής όπως αποδείξαμε και παραπάνω, εμφανίζει πολλές ομοιότητες με την ολόκληρη. Έτσι οι σχετικές μεταβολές των ενεργειών ταυτίζονται με τις αντίστοιχες της προηγούμενης γεωμετρίας, με εξαίρεση ορισμένες διαφορές. Πρώτον τα ποσοστά που εμφανίζονται στις απότομες αλλαγές της συνέχειας έχουν μικρή απόκλιση (δηλαδή στην αρχή της προσομοίωσης έχουμε $\Delta E_{rel_exch} = 12\%$). Μια σημαντική διαφορά είναι η τιμή -1 του αριθμού S που βρίσκεται στην αρχή των αξόνων έχει διαφορετικές μεταβολές. Στο μηδενικό πεδίο έχουμε συγκριτικά μεγαλύτερες μεταβολές αλλά και πάλι της τάξης των $0.06-0.2\%$. Οι διακυμάνσεις των μεταβολών συνεχίζονται με τον ίδιο ρυθμό, με την ταυτόχρονη αύξηση και ελάττωση της ανταλλαγής και απομαγνήτιση μέχρι και στην δημιουργία του σκυρμιονίου αντίστοιχα. Η εξαφάνιση του οδηγεί σε άλλη μία απότομη αύξηση της σχετικής μεταβολής της ενέργειας ανταλλαγής στα 1310% . Μπορούμε να

παρατηρήσουμε ότι η κάθε σχετική μεταβολή είναι σχεδόν συμμετρική με τον εαυτό της ως προς την αρχή των αξόνων. Οι θετικές τιμές του πεδίου οδηγούν στην ελάττωση της ενέργειας ανταλλαγής και την αύξηση της απομαγνήτισης και το αντίστροφο συμβαίνει στο αρνητικό πεδίο που εμφανίζεται το σκυρμιόνιο, με την ιδιαιτερότητα ότι και στις 2 πλευρές εμφανίζονται αυξομειώσεις των τιμών. Οι απότομες μεταβολές πάντα θα εμφανίζονται στον σχηματισμό περίπλοκων διαμορφώσεων και αυτό ισχύει για όλες τις γεωμετρίες και υλικά.

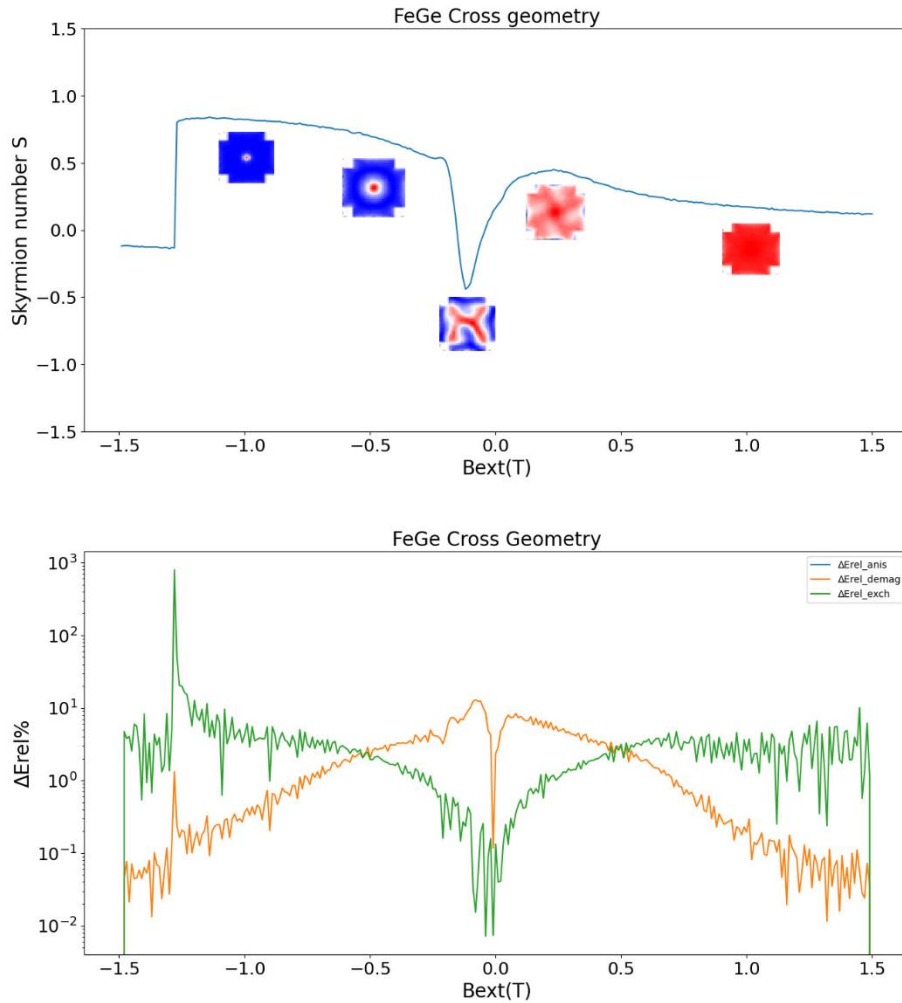


Εικόνα 43 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FeGe με την ολόκληρη γεωμετρία



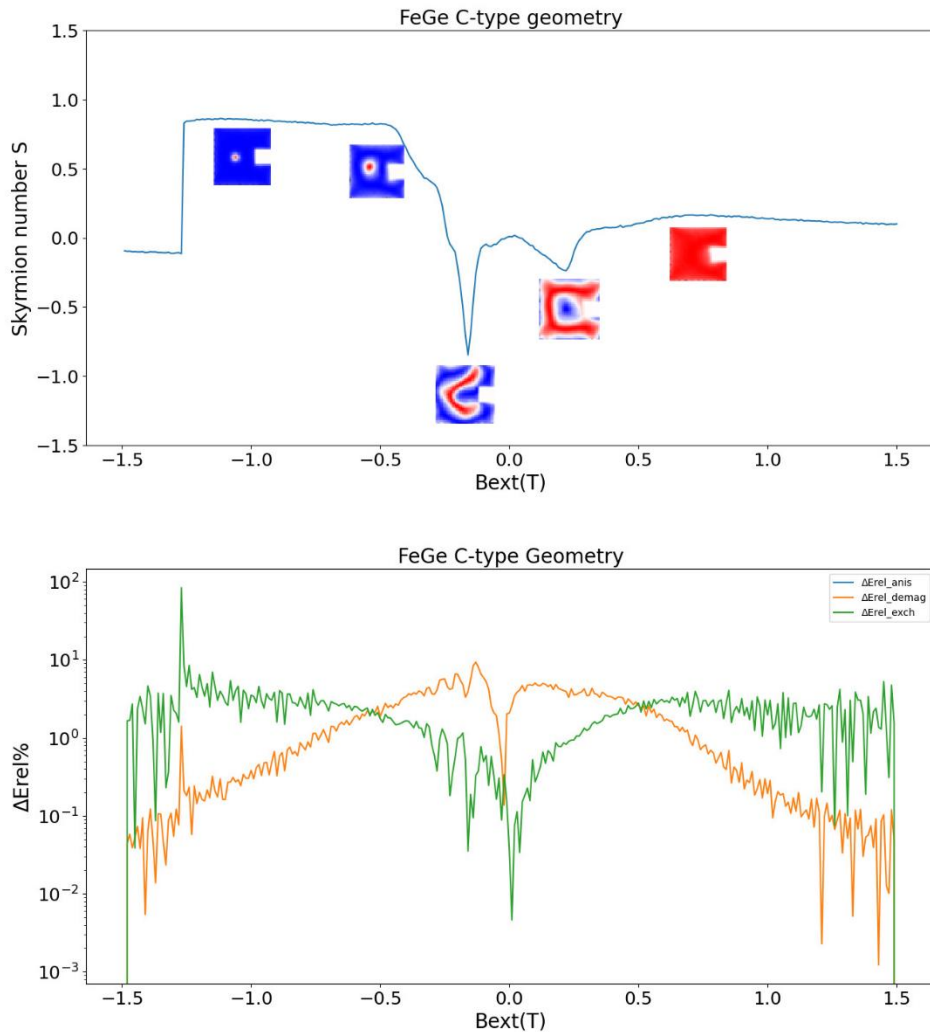
Εικόνα 44 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FeGe με την corner γεωμετρία.

Η γεωμετρία cross του FeGe εμφανίζει ενδιαφέρουσες διαφορές. Πρώτον η αρχική μεταβολή της ενέργειας ανταλλαγής είναι 6.21% και απομαγνήτισης 0.07%, ελαφρώς μικρότερες από τις προηγούμενες γεωμετρίες. Δεύτερον η αρχή των αξόνων σημειώνει πολύ μεγαλύτερη πτώση των καμπυλών σε σχέση με τις προηγούμενες, αγγίζοντας πολύ χαμηλές τιμές και για τις 2 ενέργειες. Η τάση του αριθμού S να προσεγγίζει την τιμή -1, εντοπίζεται σε αρνητικά πεδία, όπου και οι δύο καμπύλες σημειώνουν τοπική αύξηση ($\Delta E_{rel_exch} = 0.44\%$ και $\Delta E_{rel_demag} = 12.75\%$). Έπειτα η ίδια πορεία ακολουθείται πιστά και στην δημιουργία του σκυρμιονίου και η καταστροφή του συνοδεύεται με 800% μείωση της ενέργειας ανταλλαγής.



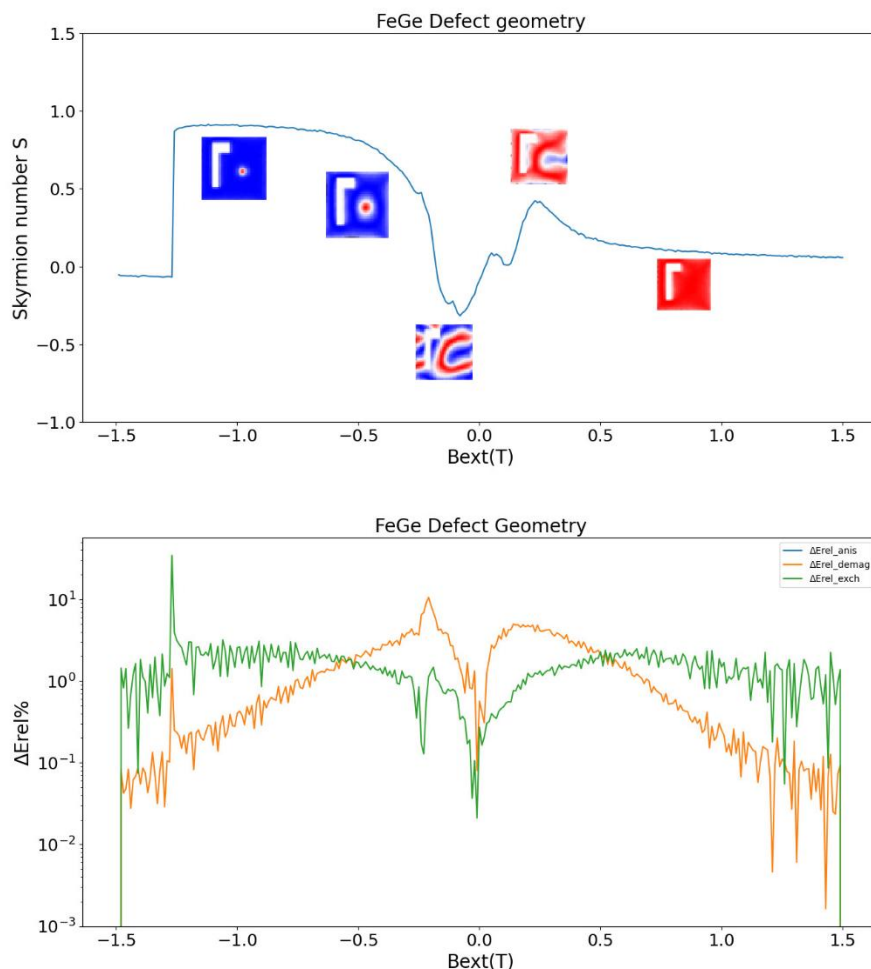
Εικόνα 4516 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FeGe με την cross γεωμετρία.

Η γεωμετρία C-type, εμφανίζει τις επιθυμητές διακυμάνσεις και στις 2 σχετικές μεταβολές των ενεργειών. Παρ' όλα αυτά μπορούμε να παρατηρήσουμε κάτι το οποίο το συμβαίνει σε όλες τις γεωμετρίες. Όσο προσεγγίζουμε το μηδενικό πεδίο, τόσο πιο μικρές και ομαλές είναι οι αυξομειώσεις των τιμών, δηλαδή δεν εμφανίζεται μεγάλη ασυνέχεια στις σχετικές μεταβολές όπως βλέπουμε στα μεγαλύτερα πεδία ανεξαιρέτου πρόσημου. Από ότι φαίνεται η σταθεροποίηση μιας διαμόρφωσης της μαγνήτισης οδηγεί σε μικρές μεταβολές των ενεργειών το οποίο είναι απολύτως λογικό. Εδώ και πάλι σημειώνεται μεγάλη πτώση στο μηδενικό πεδίο και σε κοντινές τιμές του κάθε βήμα οδηγεί σε μεγάλη διαφοροποίηση των ενεργειών σε σύγκριση με τις προηγούμενες τιμές τους. Η απόσπαση ενός κύβου από την δεξιά πλευρά οδηγεί σε χαμηλότερη μεταβολή της ενέργειας ανταλλαγής (περίπου 86%) το οποίο παρατηρούμε να συμβαίνει όσο αφαιρούμε τμήματα από το νανοσωματίδιο. Το χαμηλότερο ποσοστό μπορεί να έχει ως κύρια αίτια το μικρότερο όγκο και συμμετρία που διαθέτει το υλικό με αυτό το σχήμα.



Εικόνα 46 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FeGe με την c-type γεωμετρία

Μπορούμε να παρατηρήσουμε εύκολα ότι όσο επεξεργαζόμαστε την γεωμετρία του υλικού και επηρεάζουμε την συμμετρία του, έχουμε και διαφορετικές σχετικές μεταβολές. Η αρχική μεταβολή ελαττώνεται με την ελάττωση του όγκου του νανοσωματιδίου όπως θα παρατηρήσουμε από την ολόκληρη μέχρι την c-type γεωμετρία. Αυτό σημαίνει ότι το σύστημα εμφανίζει μεγαλύτερη ευκολία προς την αντιστροφή της μαγνήτισης υπό την επήρεια ενός βρόχου υστέρησης. Έτσι και στην γεωμετρία με την ατέλεια, η ασυνέχεια του χώρου οδηγεί σε μικρότερη σχετική μεταβολή κατά την αρχική επιβολή του πεδίου (1.39%). Η ελάττωση του πεδίου θα οδηγήσει στην ίδια συμπεριφορά που συναντούμε και στις προηγούμενες περιπτώσεις και από ότι φαίνεται οι παραπάνω λόγοι επηρεάζουν τις μεταβολές και στην καταστροφή του Néel skyrmion (35%, πολύ μικρότερο ποσοστό συγκριτικά με την ολόκληρη γεωμετρία). Επομένως όπως θα διαπιστώσουμε και στα επόμενα υλικά, η γεωμετρία και το θερμικό πεδίο αποτελούν σημαντικούς παράγοντες.



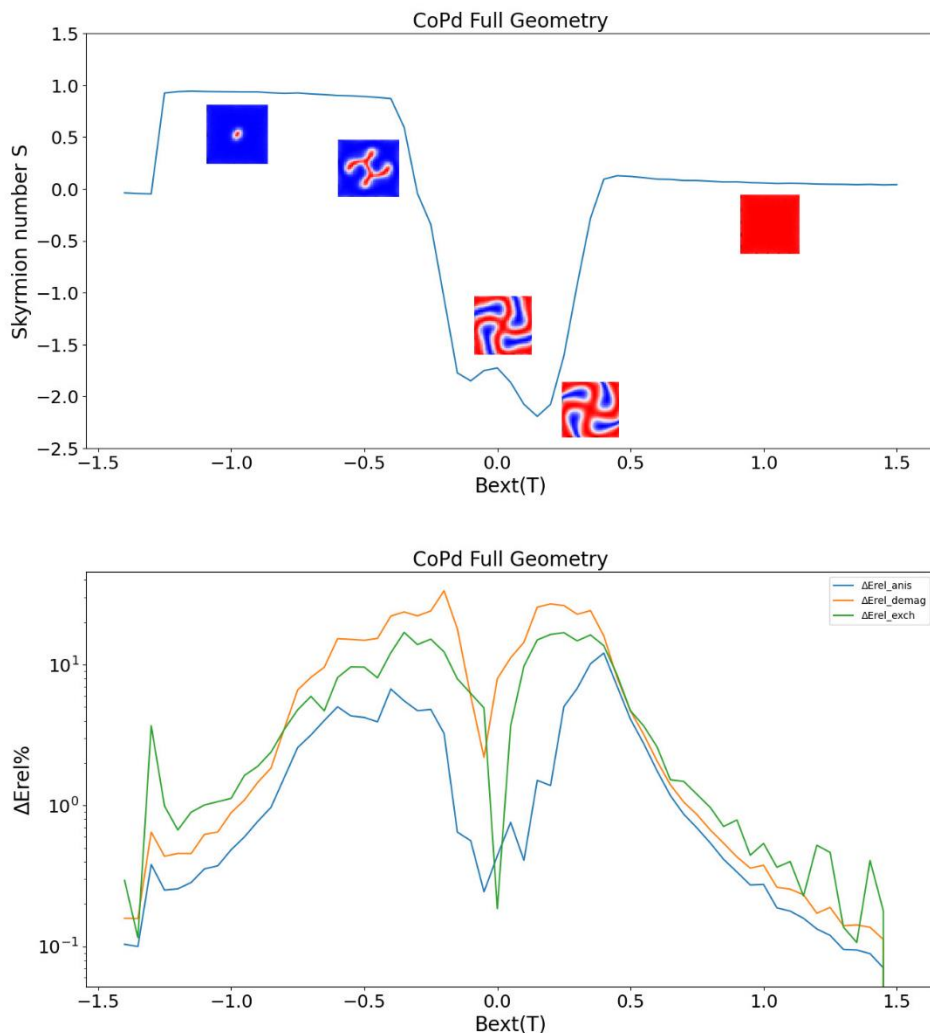
Εικόνα 47 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής και απομαγνήτισης ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FeGe με την γεωμετρία της ατέλειας

4.6.3) Σχετικές μεταβολές ενεργειών CoPd

Οι διάφορες μεταβάσεις οι οποίες συνιστούν την αντιστροφή της μαγνήτισης, οδηγούν πάλι σε αυξομειώσεις των σχετικών μεταβολών και κατά συνέπεια των ίδιων των ενεργειών. Αυτές οι διακυμάνσεις δηλώνουν την ασυνέχεια που προβάλλει η κάθε συνάρτηση ενέργειας όταν επιδρά σε αυτή κάποιο θερμικό πεδίο. Ακόμα και η χαμηλή θερμοκρασία των 10K είναι αρκετή για να διαταράξει την ισορροπία που δημιούργησαν οι υπόλοιπες 3 ενέργειες. Στην περίπτωση του CoPd έχουμε λιγότερες διακυμάνσεις επειδή όπως γνωρίζουμε έχουμε θέσει μεγαλύτερο βήμα στην μεταβολή του πεδίου άρα λιγότερα σε αριθμό.

Το σύστημα στην ολόκληρη γεωμετρία ξεκινά σε μια σχεδόν σταθερή κατάσταση όπου ο αριθμός Skyrmion S λαμβάνει τιμές κοντινές του 0, στις οποίες δεν έχει προλάβει η μαγνήτιση να σχηματίσει κάποια δομή. Σε αυτές τις περιοχές οι σχετικές μεταβολές των ενεργειών αυξάνονται με ποσοστά πολύ μικρά (περίπου 0.4%) και στα 1.3 T εμφανίζουν μια

μικρή ελάττωση 0.1%. Σε αυτές τις περιοχές οι μεταβολές είναι πολύ μικρές, είτε αυξάνονται είτε όχι, που σημαίνει ότι οι ενέργειες δεν εμφανίζουν ραγδαία μεταβολή σε σχέση με τις προηγούμενες τιμές τους. Μειώνοντας και άλλο το πεδίο στα 0.9T, όλες οι σχετικές μεταβολές σημειώνουν ανοδική πορεία μέχρι που φτάνουμε σε 3 κορυφές στα 0.4T ($\Delta E_{rel_demag} = 23\%$, $\Delta E_{rel_exch} = 16\%$ και $\Delta E_{rel_anis} = 12\%$). Μετά από αυτό εμφανίζεται η πρώτη απότομη πτώση τόσο στον αριθμό S όσο και στις σχετικές μεταβολές, όταν ολοκληρώνεται η αντιστροφή πολλών περιοχών στο νανοσωματίδιο και εμφανίζονται οι μπλε περιοχές. Σε αυτήν την περίπτωση ο αριθμός S λαμβάνει τιμές -2, και οι σχετικές μεταβολές των ενεργειών έχουν ελαττωθεί πάρα πολύ που λαμβάνουν τιμές $<0.1\%$. Στο μηδενικό πεδίο μόνο η μεταβολή της ενέργειας ανισοτροπίας φαίνεται να αυξομειώνεται αλλά παραμένει σε τιμές πολύ χαμηλές, ενώ οι υπόλοιπες εμφανίζουν μια απότομη ασυνέχεια.



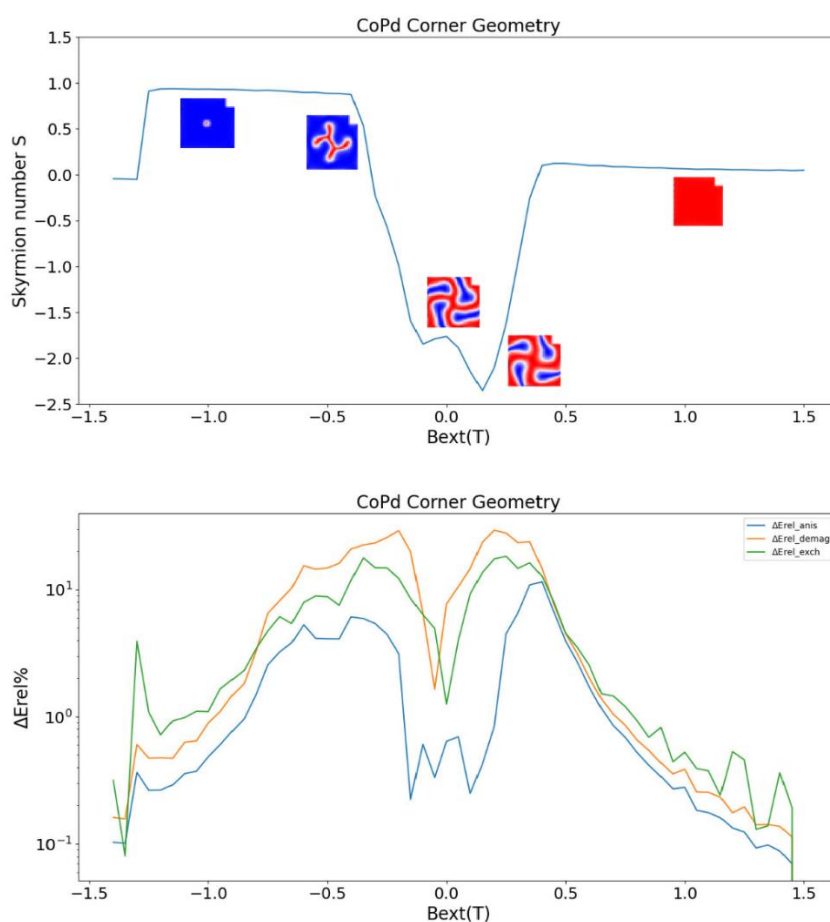
Εικόνα 48 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skymion S για το κράμα CoPd με την ολόκληρη γεωμετρία

Με την αντιστροφή του πεδίου, επιδιώκει το σύστημα την κατασκευή του σκυρμιονίου. Η πορεία αυτή οδηγεί στην μεγάλη αύξηση των σχετικών μεταβολών και των 3 ενεργειών με $\Delta E_{rel_demag} = 33\%$, $\Delta E_{rel_exch} = 15\%$ και $\Delta E_{anis} = 4.8\%$ οι οποίες συγκριτικά με τις αμέσως προηγούμενες τιμές είναι πολύ μεγαλύτερες. Αυτό σημαίνει ότι όταν το σύστημα τείνει να κατασκευάσει μια συμμετρική διαμόρφωση, χρειάζεται η παρέμβαση και των 3 ενεργειών. Η σταθεροποίηση του σκυρμιονίου προκαλεί την σταθερή μείωση και των 3 μεταβολών μέχρι και σε πολύ χαμηλά ποσοστά (<1%). Η καταστροφή του οδηγεί σε μια τοπική αύξηση στους ($\Delta E_{rel_demag} = 0.63\%$, $\Delta E_{rel_exch} = 3.75\%$ και $\Delta E_{rel_anis} = 0.38\%$) που σημαίνει ότι η ενέργεια ανταλλαγής επηρεάζεται περισσότερο με τον εξαφανισμό του. Παρατηρώντας όλα τα παραπάνω η ενέργεια απομαγνήτισης συνοδεύει με μεγαλύτερα ποσοστά τις διάφορες διαμορφώσεις ενώ μόνο στην αρχή της προσομοίωσης η ενέργεια ανταλλαγής φαίνεται να μεταβάλλεται περισσότερο έναντι των άλλων δύο.

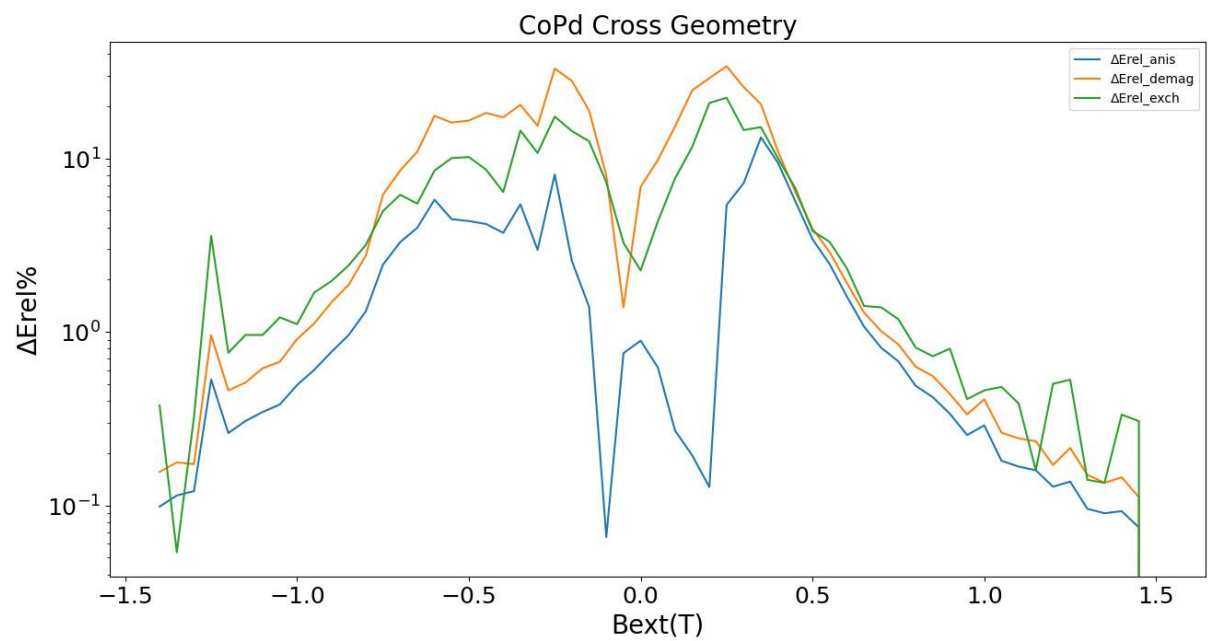
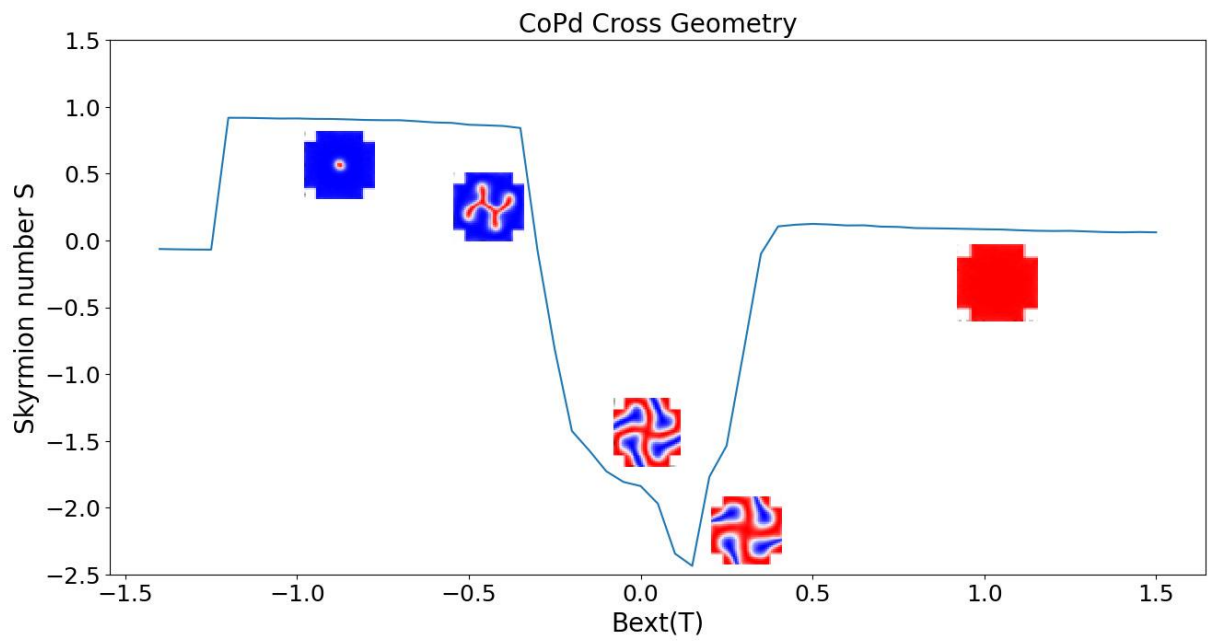
Ο τρόπος που μεταβάλλεται ο αριθμός S στην Corner γεωμετρία ταυτίζεται πολύ με την προηγούμενη. Αυτό έχει ως επακόλουθο οι σχετικές μεταβολές να έχουν σχεδόν ίδια συμπεριφορά. Στην αρχή εμφανίζουν την ίδια ανοδική πορεία και στην χρονική στιγμή που έχουμε την εμφάνιση των λευκών περιοχών, έχουμε τις πρώτες ψηλές κορυφές ($\Delta E_{rel_exch} = 16.35\%$ στα 0.35 T και $\Delta E_{rel_anis} = 11.55\%$) ενώ η μεταβολή της ενέργειας απομαγνήτισης αυξάνεται ραγδαία στην εμφάνιση των μπλε περιοχών ($\Delta E_{rel_demag} = 29.37\%$ στα 0.1%). Όταν μηδενίζεται το πεδίο έχουμε τις ίδιες πτώσεις για όλες τις ενέργειες και μόνο η μεταβολή της ανισοτροπίας εμφανίζει ασυνέχεια σε αυτό το σημείο. Η διαδικασία δημιουργίας του σκυρμιονίου σηματοδοτεί πάλι την τοπική αύξηση όλων των μεταβολών και όσο μειώνεται η διάμετρος του ακολουθεί μια καθοδική πορεία για κάθε μεταβολή. Η ενέργεια απομαγνήτισης διαδραματίζει σημαντικό ρόλο στην κατασκευή του ενώ στον εξαφανισμό μεγαλύτερη μεταβολή εμφανίζεται στην ενέργεια ανταλλαγής. Τέλος η γεωμετρία με τον σταυρό εμφανίζει πάρα πολλές ομοιότητες με την corner, με τις μόνες διαφορές να εμφανίζονται στα ποσοστά των υψηλών κορυφών ($\Delta E_{rel_demag} = 35\%$ για B=0.4 T, $\Delta E_{rel_exch} = 23\%$ και $\Delta E_{rel_anis} = 13\%$ για B=0.35 T).

Η ίδια ομοιομορφία συναντάται και στην C-type γεωμετρία. Εμφανίζεται παρόμοια συμμετρία ως προς την αρχή των αξόνων και οι σχετικές μεταβολές παρουσιάζουν τις αναμενόμενες αυξομειώσεις λόγω της θερμοκρασίας. Η μόνη διαφορά είναι ότι από το σημείο που ξεκινά να χτίζεται το σκυρμιόνιο, δεν έχουμε μεγάλες μεταβολές των ενεργειών σε σχέση με τα παραπάνω ($\Delta E_{rel_demag} = 16.8\%$, $\Delta E_{rel_exch} = 14\%$ και $\Delta E_{rel_anis} = 5\%$). Η περίεργη ασύμμετρη γεωμετρία δεν απαιτεί τεράστιες ενεργειακές μεταβολές για τον σχηματισμό του.

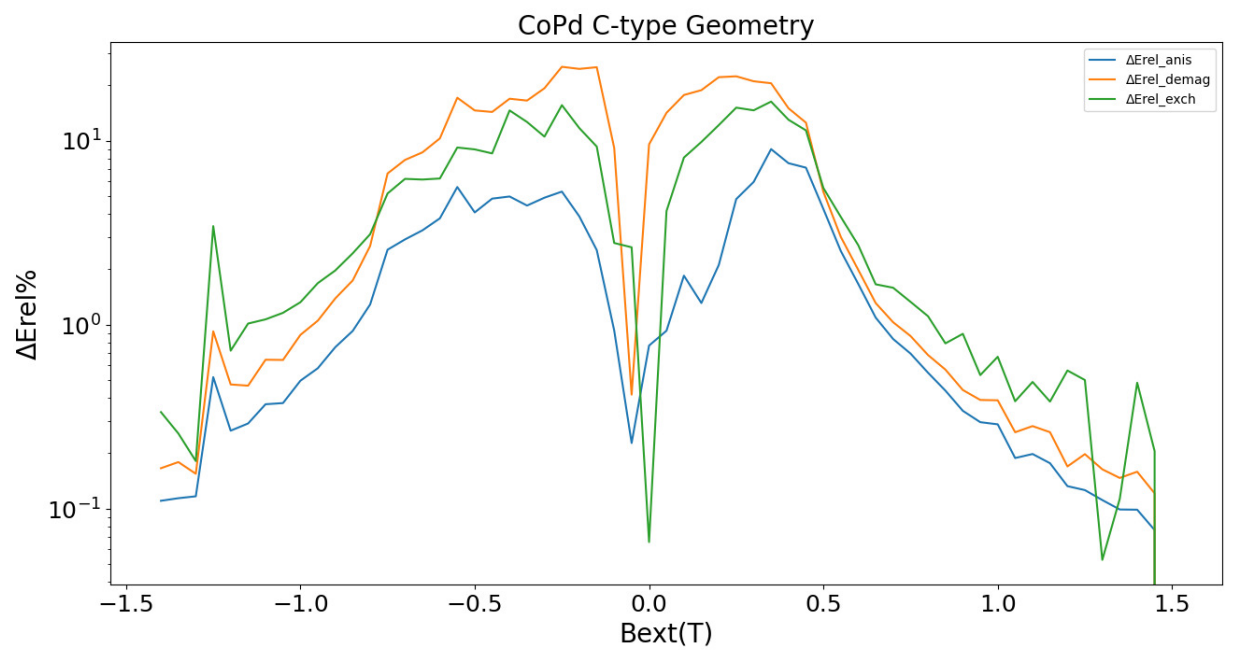
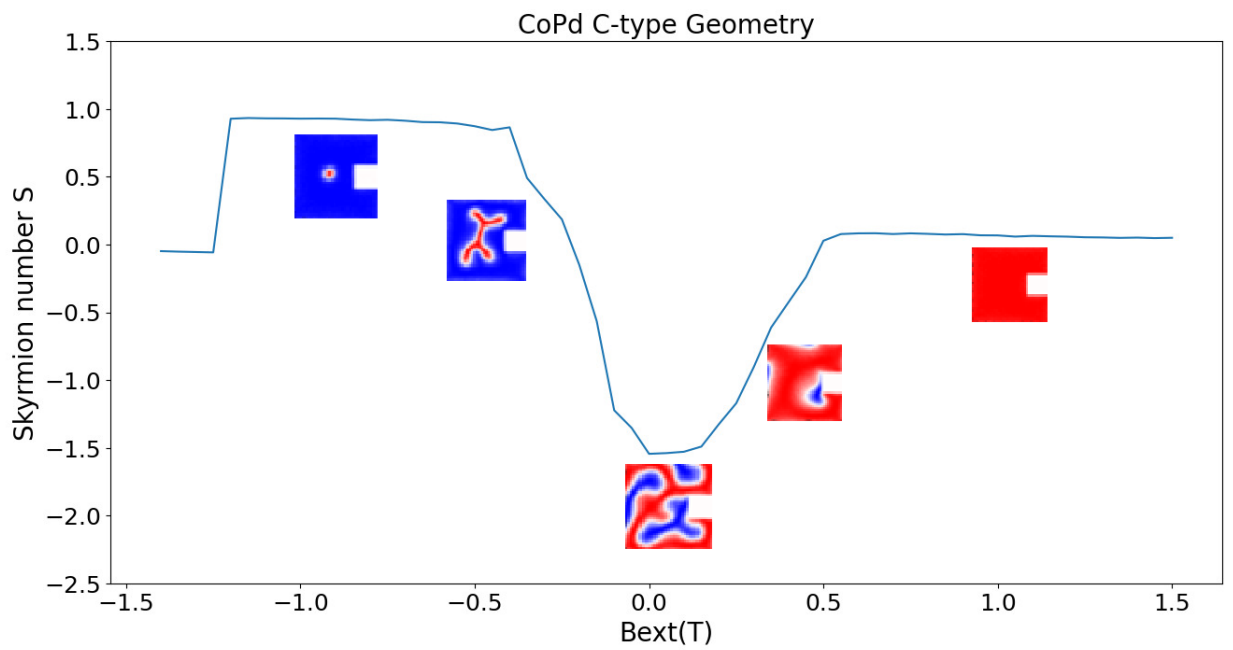
Τέλος, η γεωμετρία με την ατέλεια εμφανίζει διαφορές όταν πρόκειται να σχηματίσει 2 σκυρμιόνια και να τα διατηρήσει για τα συγκεκριμένα πεδία. Όταν έχουμε πεδίο $B=-0.2T$ προετοιμάζει το σύστημα την κατασκευή του πρώτου σκυρμιονίου και την συνύπαρξη του με το stripe που θα δώσει και το 2^ο σκυρμιόνιο. Σε αυτό το σημείο η ενέργεια απομαγνήτισης σημειώνει αύξηση $\Delta E_{rel_demag}= 23\%$ και $\Delta E_{rel_exch} = 15\%$ ενώ η ανισοτροπίας σχεδόν παραμένει σταθερή. Στα $-0.5 T$, σημειώνεται $\Delta E_{rel_demag} = 11.7\%$, $\Delta E_{rel_exch} = 10\%$ και $\Delta E_{rel_anis} = 3.49\%$ που σημαίνει ότι όλες οι ενέργειες μεταβλήθηκαν αισθητά και στις 3 περιπτώσεις αλλά όχι τόσο όσο στα $-0.2 T$. Από αυτό το σημείο οι μεταβολές ακολουθούν καθοδική πορεία που σημαίνει ότι η μετατροπή του stripe σε σκυρμιόνιο από την μια μεταβάλλει και τις 3 ενέργειες αλλά με χαμηλότερο ρυθμό. Στα $-0.8 T$ έχουμε και το 2^ο σκυρμιόνιο, και στο σημείο αυτό οι μεταβολές βρίσκονται σε ποσοστά $<4\%$, που σημαίνει ότι η μικρή μεταβολή του πεδίου δεν απαιτεί σημαντικά μεγάλη μεταβολή των ενεργειών. Η εξαφάνιση του πρώτου σκυρμιονίου προκαλεί μια τοπικά μεγάλη αύξηση τους ενώ στον δεύτερο εξαφανισμό παρατηρούμε μια ελάττωση.



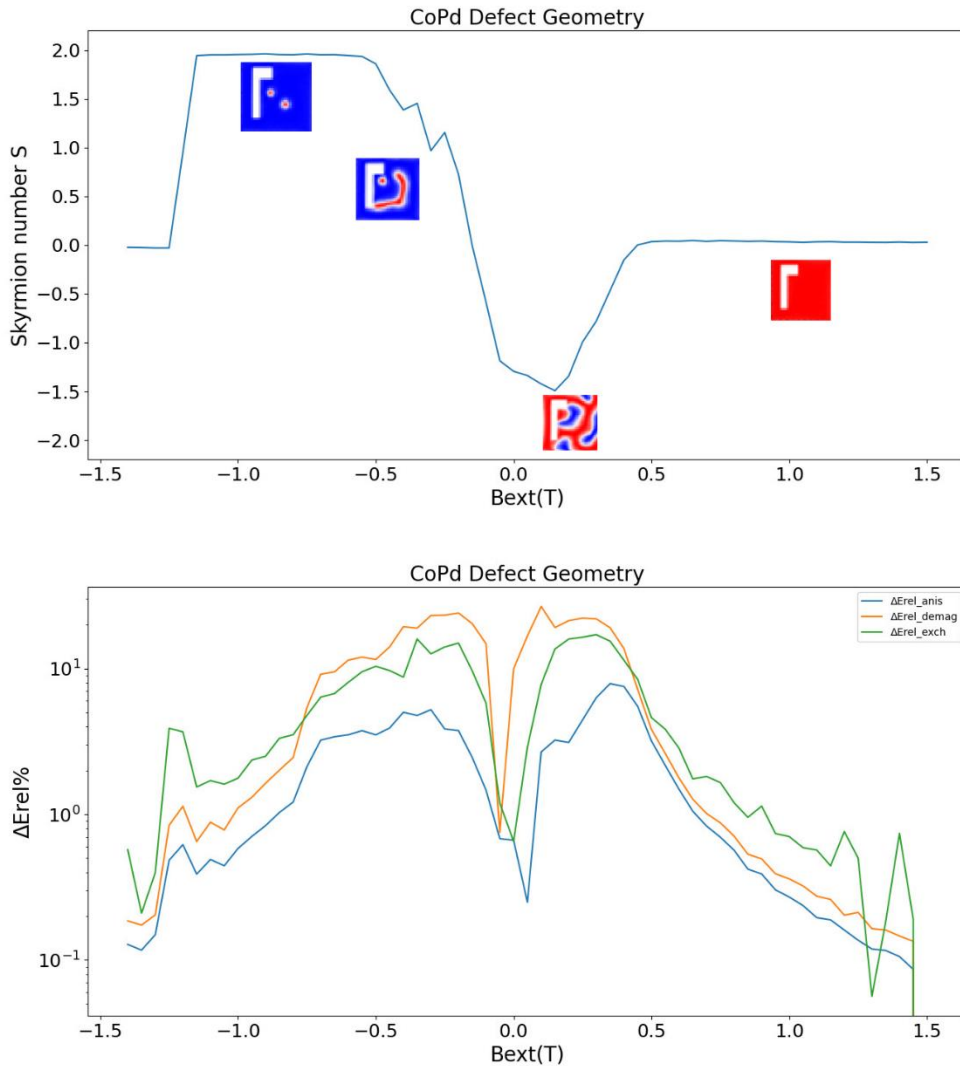
Εικόνα 49 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skymion S για το κράμα CoPd με την corner γεωμετρία.



Εικόνα 17 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα CoPd με την cross γεωμετρία.



Εικόνα 51 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα CoPd με την c-type γεωμετρία

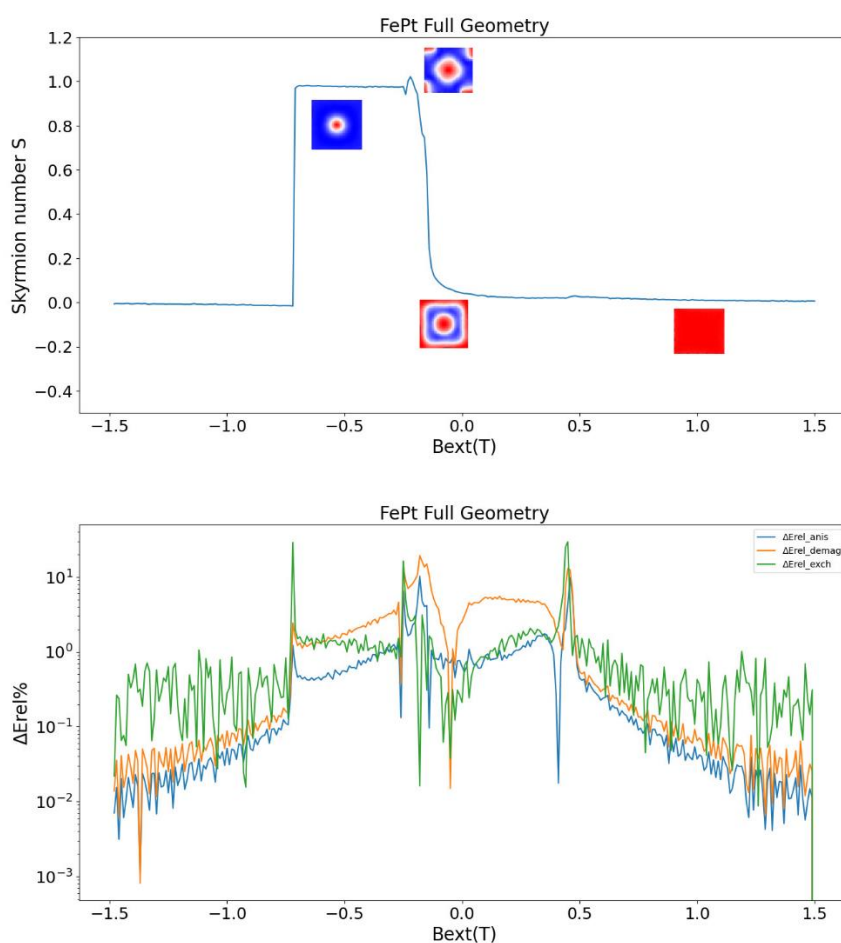


Εικόνα 52 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skymion S για το κράμα CoPd με την γεωμετρία με την ατέλεια.

4.6.4) Σχετικές μεταβολές ενεργειών FePt

Σε αντίθεση με τα προηγούμενα υλικά, το κράμα FePt εμφανίζει σχετικές μεταβολές των ενεργειών με πολλαπλές και απότομες διακυμάνσεις σε όλη την διάρκεια των προσομοιώσεων εκτός από συγκεκριμένα σημεία τα οποία και θα αναλύσουμε. Σε όλες τις γεωμετρίες σημειώνεται μια σχετικά απότομη αύξηση των σχετικών μεταβολών και παρόλο που εμφανίζουν πολύ μεγάλες και πολυάριθμες διακυμάνσεις, συνολικά ακολουθούν ανοδική πορεία με ποσοστά <1% όσο πραγματοποιείται η αντιστροφή προς τον σχηματισμό του δακτυλίου. Στα 0.4 T όπου και εμφανίζεται το Skymionium, η μεταβολές αυξάνονται κατά πολύ σε σύγκριση με τις προηγούμενες περιπτώσεις, που σημαίνει ότι ο σχηματισμός του απαιτεί μεγάλη μεταβολή κυρίως στην ενέργεια ανταλλαγής, μετά στην ενέργεια απομαγνήτισης και λιγότερο στην ανισοτροπίας. Έπειτα, γνωρίζουμε ότι το Skymionium

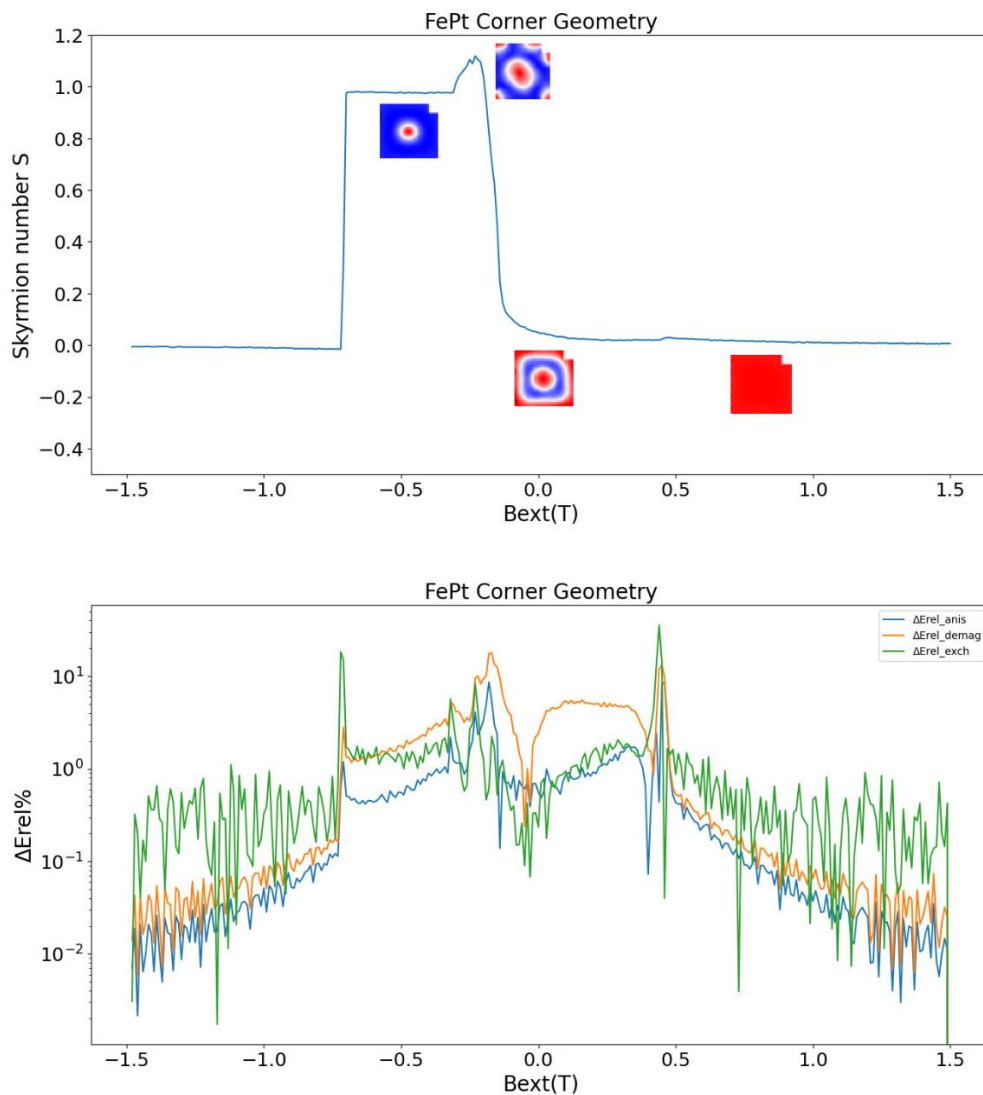
προεκτείνεται στο χώρο της άνω επιφάνειας με στόχο την διατήρηση του εσωτερικού πυρήνα που είναι και το επόμενο σκυρμιόνιο. Σε αυτό το μεσοδιάστημα, η μεταβολή της ενέργειας απομαγνήτισης φαίνεται σαν να σταθεροποιείται γύρω από το 4%, που σημαίνει ότι κάθε βήμα αυξάνεται κατά αυτό το ποσοστό. Οι άλλες δύο ελαττώνονται στο ίδιο διάστημα σε ποσοστά <1% που σημαίνει πολύ μικρή μεταβολή μετά από κάθε βήμα. Το στιγμιότυπο της δημιουργίας του σκυρμιονίου συνοδεύεται με μεγάλη αύξηση των σχετικών μεταβολών και των τριών ενεργειών και η διατήρηση του οδηγεί σε μια κατάσταση όπου η ενέργεια ανταλλαγής μεταβάλλεται ελάχιστα (περίπου 1.6%), η απομαγνήτισης κυμαίνεται μεταξύ 2-3% και η ανισοτροπίας στα πολύ χαμηλά ποσοστά (περίπου 0.5%).



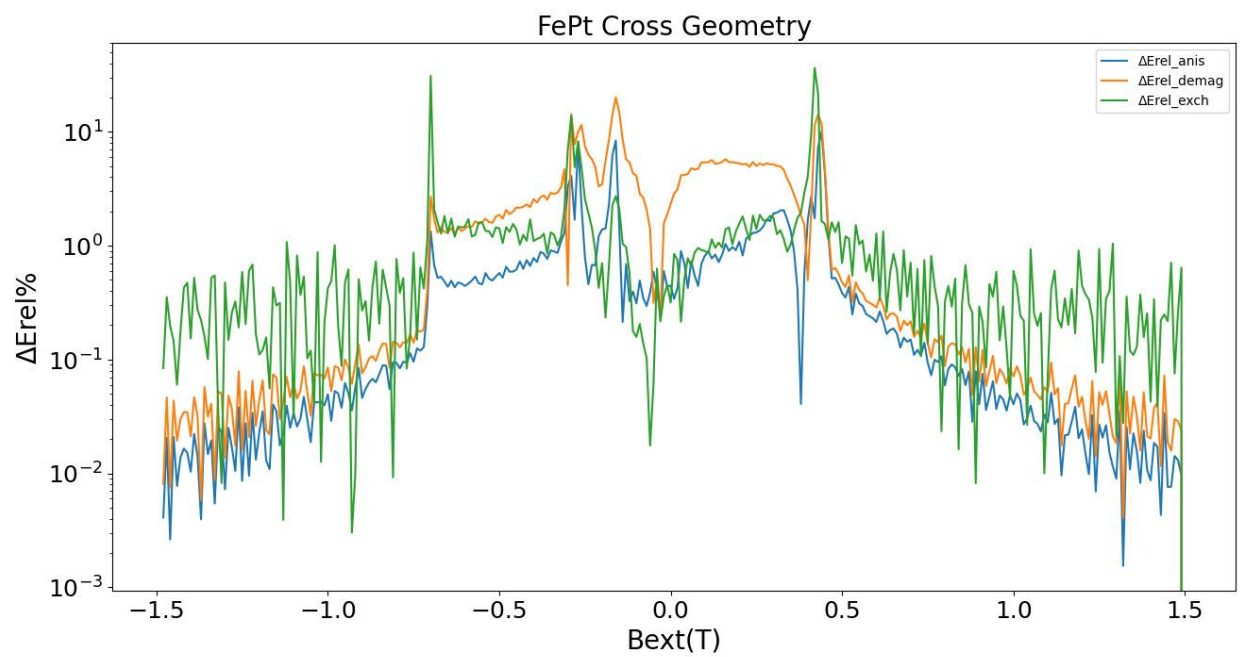
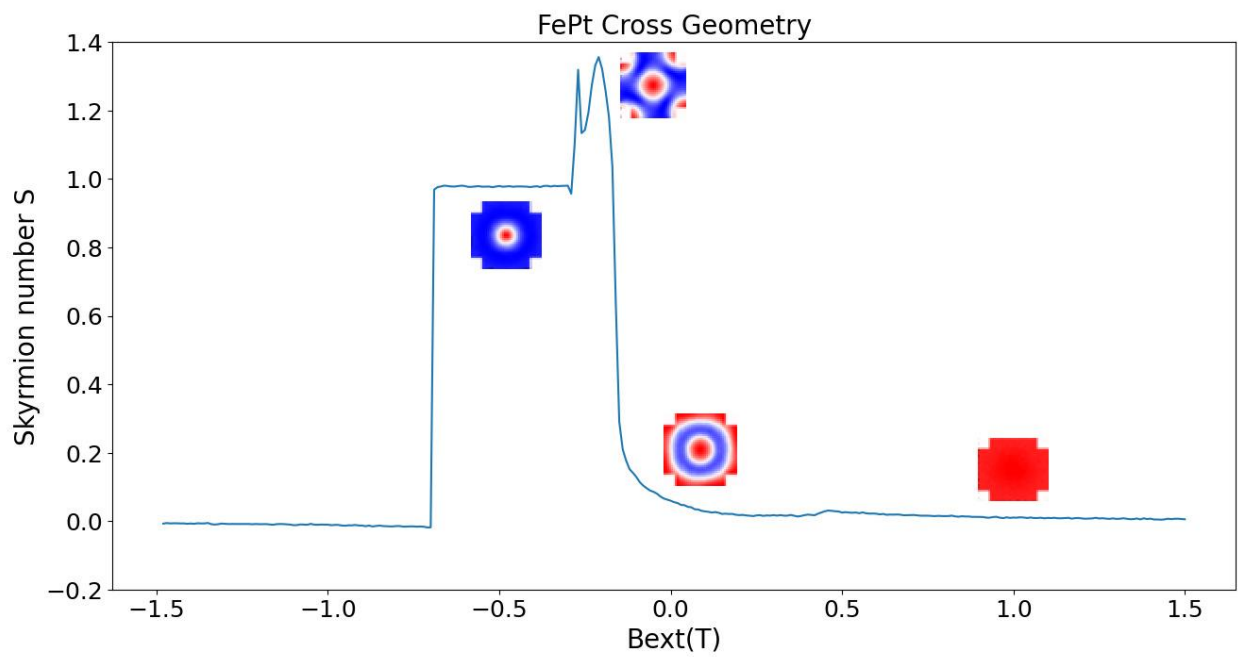
Εικόνα 53 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FePt με την ολόκληρη γεωμετρία.

Το σκυρμιόνιο σε όλες τις γεωμετρίες αυτού του υλικού, δημιουργείται σύμφωνα με την πολύ μεγάλη μεταβολή της ενέργειας ανταλλαγής, μιας και οι υπόλοιπες δύο μεταβάλλονται πολύ λίγο και μπορούμε να πούμε ότι δεν επηρεάζουν σημαντικά. Το ενδιαφέρον σε αυτό το υλικό είναι ότι παρατηρώντας τα διαγράμματα των σχετικών μεταβολών με τον αντίστοιχο αριθμό S , οι περιοχές που δηλώνουν την ύπαρξη σκυρμιονίου

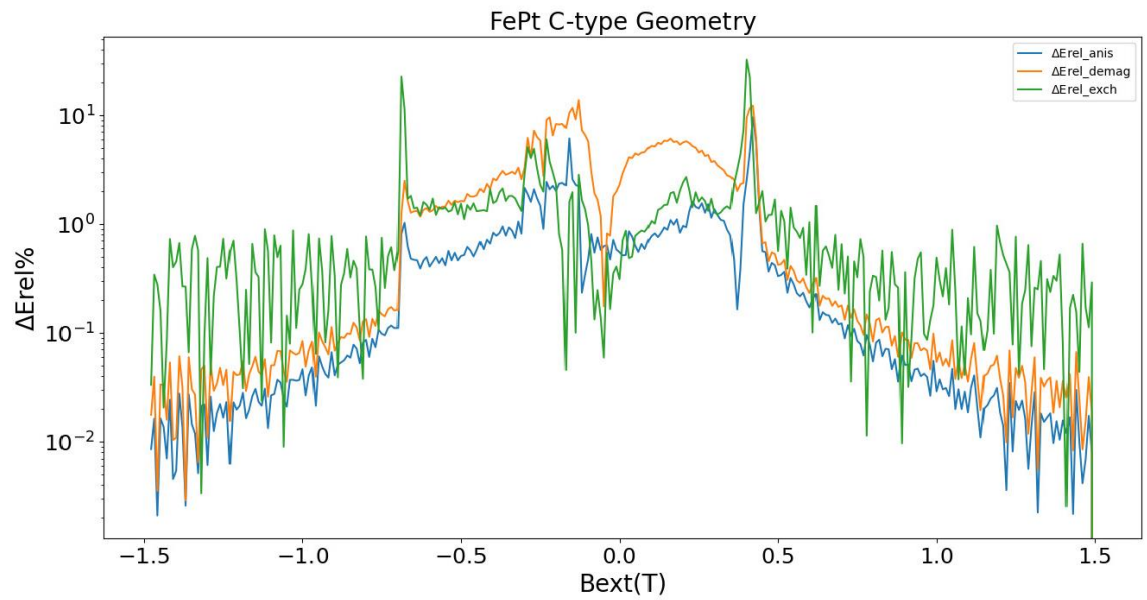
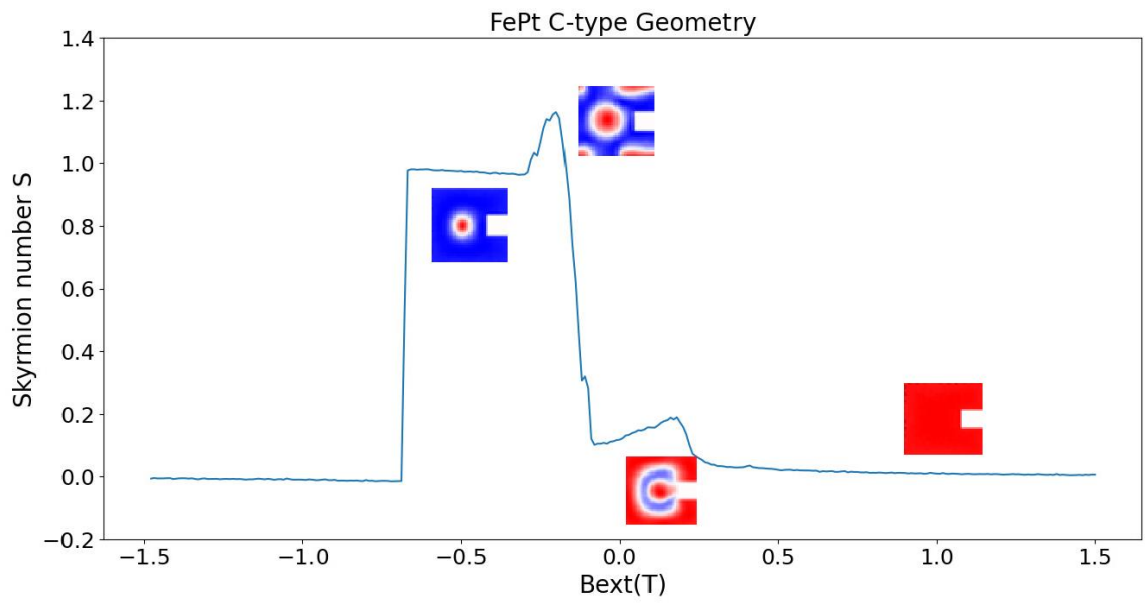
ταυτοποιούνται πολύ εύκολα γιατί διαφοροποιούνται από τα υπόλοιπα διαγράμματα. Σε όλο το διάγραμμα βλέπουμε μεγάλες αυξομειώσεις και στις 3 σχετικές μεταβολές οι οποίες αυξάνονται σταδιακά μέχρι την δημιουργία του Skyrmionium. Μετά σχεδόν διατηρείται η ενέργεια απομαγνήτισης ενώ οι άλλες ελαττώνουν τις μεταβολές και στην δημιουργία του σκυρμιονίου η ενέργεια ανταλλαγής ενισχύεται κατά πολύ. Όσο διατηρείται το σκυρμιόνιο, οι ενέργειες παραμένουν σχεδόν σταθερές. Η εξαφάνιση του προκαλεί την μεγάλη μεταβολή της ενέργειας ανταλλαγής και εμφανίζονται μετά οι ίδιες διακυμάνσεις των μεταβολών που παρατηρήσαμε στα θετικά πεδία πριν το Skyrmionium. Ίδιο διάγραμμα θα παρατηρήσουμε και στην περίπτωση της ατέλειας, καθώς σχηματίζεται πάλι σκυρμιόνιο απλά στα θετικά πεδία. Οι μεταβολές θα εμφανιστούν παρόμοιες αλλά σε διαφορετικό εύρος τιμών πεδίου.



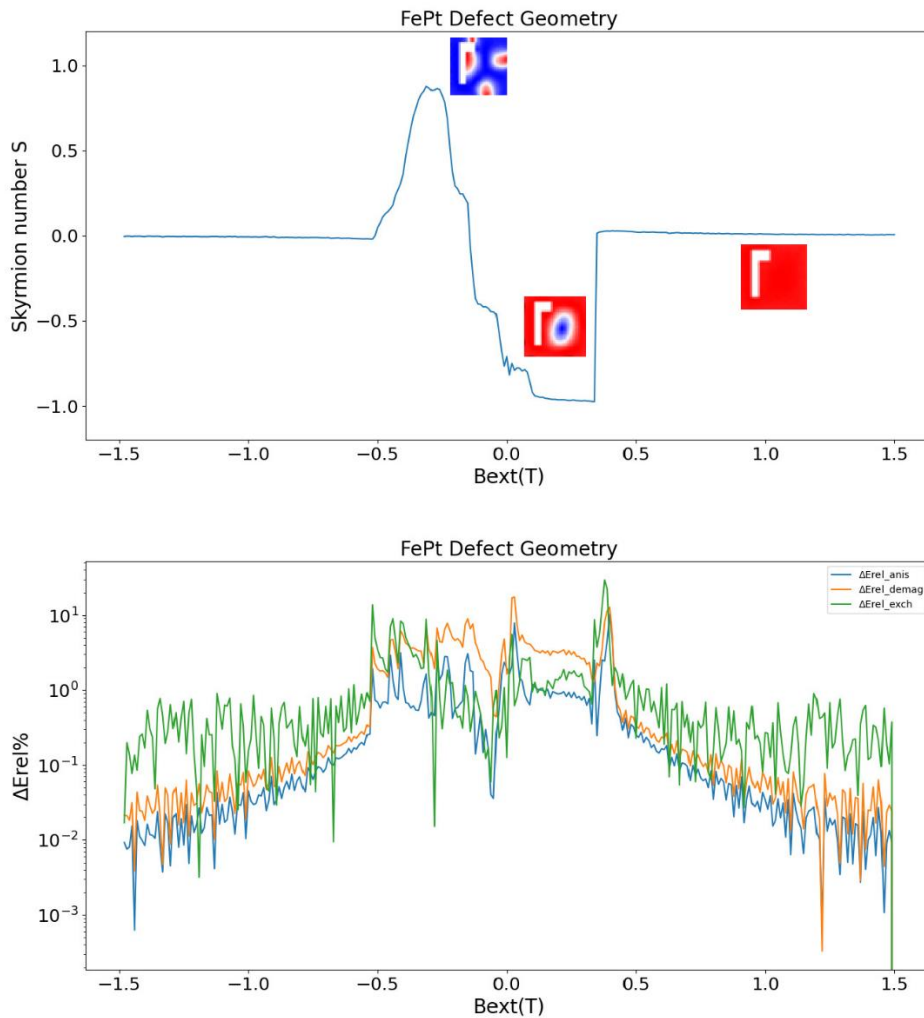
Εικόνα 54 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FePt με την corner γεωμετρία.



Εικόνα 55 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FePt με την cross γεωμετρία.



Εικόνα 18 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FePt με την c-type γεωμετρία.



Εικόνα 57 Διάγραμμα των σχετικών μεταβολών των ενεργειών ανταλλαγής, απομαγνήτισης και ανισοτροπίας ως προς το πεδίο μαζί με την εξέλιξη του αριθμού Skyrmion S για το κράμα FePt με την defect γεωμετρία.

4.7) Συμπεράσματα

Ένα γενικό συμπέρασμα που μπορούμε να εκλάβουμε, είναι ότι η εμφάνιση σκυρμιονίων επιτρέπεται και στα 3 υλικά αλλά σε διαφορετικά εύρη πεδίων. Κάθε κράμα διαθέτει ένα συγκεκριμένο εύρος τιμών πεδίου μέσα στο οποίο μπορεί να διατηρηθεί κάποιο σκυρμιόνιο και δεν μεταβάλλεται υπερβολικά στις γεωμετρίες που έχουμε επιλέξει. Τη μόνη εξαίρεση αποτελεί η γεωμετρία με την ατέλεια στις περιπτώσεις του CoPd και FePt.

Η απουσία της ενέργειας ανισοτροπίας στην περίπτωση του FeGe αποδίδει ένα μεγάλο μερίδιο ευθύνης στις ενέργειες ανταλλαγής και απομαγνήτισης. Η στιγμή που δημιουργείται το σκυρμιόνιο δεν προκαλεί μεγάλες σχετικές μεταβολές στις ενέργειες. Όσο μειώνεται η διάμετρός του στο συγκεκριμένο εύρος τιμών, η σχετική μεταβολή της ενέργειας ανταλλαγής σημειώνει αύξηση ενώ της απομαγνήτισης ελάττωση. Ωστόσο υφίστανται και τα 2 σε πολύ μικρά ποσοστά που σημαίνει ενεργειακά το σύστημα μπορεί να παραμείνει

σταθερό. Όλες οι γεωμετρίες του έχουν τις ίδιες σχεδόν αυξομειώσεις των σχετικών μεταβολών, και την ίδια μεταβολή του αριθμού skyrmion S . Η Εξάλειψη του σκυρμιονίου σηματοδοτεί υψηλή μεταβολή στην ενέργεια ανταλλαγής, το οποίο εξηγεί ότι σε αυτό το πεδίο είναι προτιμητέα η ευθύγραμμη τοποθέτηση των ροπών. Παρ' όλα αυτά το κράμα εξυπηρετεί το σκοπό του και σύμφωνα με αυτές τις συνθήκες έχουμε παρουσία σκυρμιονίου.

Η παρουσία DM αλληλεπιδράσεων και ανισοτροπίας σε συνδυασμό με όλους τους υπόλοιπους ενεργειακούς παράγοντες, μπορούν να συμβάλλουν στην παραγωγή διαμορφώσεων ικανών να εμφανίσουν σκυρμιόνια. Το κράμα CoPd διαθέτει όλες τις παραμέτρους που δεν εντοπίζονται από τα άλλα δύο υλικά. Εμφανίζει σχεδόν παρόμοια συμπεριφορά με το κράμα FeGe , με την διαφορά ότι είναι ικανό να σχηματίσει 2 σκυρμιόνια και όσο παράγεται το δεύτερο, το πρώτο μετατοπίζεται καθέτως, κάτι το οποίο δεν συναντάται πουθενά αλλού.

Εντελώς διαφορετική συμπεριφορά εμφανίζει το τελευταίο κράμα FePt . Παρ' όλο που δεν διαθέτει DM αλληλεπιδράσεις αλλά με την βοήθεια και τον μεταξύ ανταγωνισμό όλων των υπόλοιπων ενεργειακών παραγόντων (μαζί και της ανισοτροπίας), έχουμε και σε αυτό το υλικό παραγωγή σκυρμιονίου. Η διαφορά είναι ότι έχουμε πολύ μεγαλύτερα σκυρμιόνια σε διάμετρο, αλλά διατηρούνται σε μικρότερο εύρος τιμών πεδίου σε σχέση με τα σκυρμιόνια των άλλων κραμάτων. Η παρουσία του σκυρμιονίου συνοδεύεται με τις σχεδόν ίδιες σχετικές μεταβολές των ενεργειών, όπου ταλαντώνονται ελαφρώς γύρω από μια μέση τιμή. Τέλος το αξιοσημείωτο είναι ότι η προσθήκη μιας ασύμμετρης ατέλειας σε τυχαίο σημείο, παράγεται σκυρμιόνιο σε εντελώς διαφορετικό πεδίο από τις άλλες γεωμετρίες και από τις αντίστοιχες σε διαφορετικά υλικά.

Οι διαφορές που συναντώνται μεταξύ των κραμάτων μπορούν εύλογα να εντοπιστούν τόσο στην αντιστροφή της μαγνήτισης, στη μεταβολή του αριθμού Skyrmion S , στα οπτικά αποτελέσματα και συνάμα στις διαφορετικές σχετικές μεταβολές των ενεργειών. Όλα αυτά υποδηλώνουν το ενδιαφέρον που διαθέτουν και τα τρία υλικά καθώς επιτελούν το σκοπό τους, ο οποίος είναι η δημιουργία και διατήρηση μαγνητικών σκυρμιονίων κατά την διάρκεια μισού βρόχου υστέρησης σε θερμικό πεδίο και πολλαπλές γεωμετρίες. Παρατηρούμε ότι ακόμα και με την αφαίρεση πολλών τμημάτων του υλικού και την διατάραξη της συμμετρίας, δεν παύει η μαγνήτιση να επιτρέπει τον ομαλό σχηματισμό τους.

Επίλογος

Ο Μικρομαγνητισμός αποτελεί ένα πλέον απαραίτητο εργαλείο για την παρατήρηση, κατανόηση μαγνητικών φαινομένων και για τον μετέπειτα σχεδιασμό ικανών, καινοτόμων και προηγμένων μαγνητικών υλικών. Η εμφάνιση πολύπλοκων μαγνητικών διαμορφώσεων, αποτελείται από πολλά ενεργειακά εμπόδια τα οποία μπορούμε να υπερβούμε με τον συνονθύλευμα πολλών εξωτερικών και εσωτερικών παραγόντων. Μέσα σε αυτές τις διαμορφώσεις μπορούν να ενταχθούν και τα μαγνητικά σκυρμιόνια, τα οποία και μελετάμε στην παρούσα εργασία. Η χρήση υπολογιστικών εργαλείων για την εκτέλεση προσομοιώσεων, παρέχει ενδιαφέροντα αποτελέσματα σχετικά με την συμπεριφορά που επιδεικνύουν τα τρία επιλεγμένα σιδηρομαγνητικά κράματα. Ο συνδυασμός αυτών με οποιοδήποτε πραγματικό πείραμα, προσφέρει μοναδικά οφέλη στην επιστημονική κοινότητα μιας και δίνεται η δυνατότητα αποτελεσματικότερης κατανόησης όλων των περίπλοκων φαινομένων.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- 1) B. D. Cullity, C. D. Graham, Introduction to Magnetic Materials, Second Edition, Wiley, Hoboken, N.J., pages 1-2, Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc., (2008)
- 2) J.M.D. Coey, Magnetic materials, Physics Department, Trinity College, Dublin 2, Ireland, Journal of Alloys and Compound, (2000)
- 3) Ι. Παναγιωτόπουλος, Μαγνητικά Υλικά, Επιστημονικές και Τεχνολογικές εκδόσεις Α.Γ. Πνευματικός, σελ. 1-2, 5-6, 89-91, 104, Αθήνα (2010)
- 4) EncyclopediaMagnetica:http://www.emagnetica.pl/doku.php/magnetic_dipole_moment
- 5) S.O.Kasap, Principles of Electronic Materials and Devices, Fourth Edition, Chapter: Magnetic Properties and Superconductivity, pages 666-668, MC Graw Hill Education, (2018)
- 6) K. M. Krishnan, Fundamentals and Applications of Magnetic Materials, pages 23-25, (Oxford, 2016; online edn, Oxford Academic, 22 Dec. 2016)
- 7) N. Abdalrazaq, The Effect of Magnetized Nutrition on Bone Density The Requirements for the Degree of M.Sc. in Physics Nour Acknowledgement, University of Diyala, (2009)
- 8) Β. Σταύρου, Μελέτη Μαγνητικών Υλικών με Μικρομαγνητικές Προσομοιώσεις, Διδακτορική διατριβή, Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, (2021)
- 9) The Hysteresis Loop, Iowa State university, Center for Nondestructive Evaluation: <https://www.nde-ed.org/Physics/Magnetism/HysteresisLoop.xhtml>
- 10) Encyclopedia of Solid Earth Geophysics, Encyclopedia of Earth Sciences Series: Chapter 3, Curie Temperature (2019)
- 11) Ν. Νταλλής, Υπολογιστικές εφαρμογές της θεωρίας του μικρομαγνητισμού, Διδακτορική διατριβή, Msc Φυσικής και Τεχνολογίας Υλικών, ΑΠΘ (2016)
- 12) X.Zhang, Y. Zhou, K.M. Song, T. Park, J. Xia, M. Ezawa, X. Liu, W. Zhao, G. Zhao, S. Woo, Skyrmion-electronics: Writing, deleting, reading and processing magnetic skyrmions toward spintronic applications, Journal of Physics: Condensed Matter, vol 32, Number 14, (2019)
- 13) K. Everschor-Sitte, J. Masell, R. M. Reeve, M. Kläui; Perspective: Magnetic skyrmions— Overview of recent progress in an active research field. J. Appl. Phys. 28 December 2018; 124 (24): 240901.

- 14) M. Mcintyre, G. Cairns, "A new formula for winding number", University of Edinburgh (1993)
- 15) R. Rajaraman, "An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory", First Edition ,Vol 15, (1987)
- 16) O. Yabuhara, M.Ohtake, K. Tobar, T. Nishiyama, Structural and magnetic properties of FePd and CoPd alloy epitaxial thin films grown on MgO single-crystal substrates with different orientations, Faculty of Science and Engineering, Chuo University, Tokyo Japan (2011)
- 17) A. Fert, N. Reyren, V. Cros, Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications. *Nat Rev Mater* 2, 17031 (2017)
- 18) W. Wei, Z. He, Z. Qu, H. Du, Dzyaloshinsky–Moriya interaction (DMI)-induced magnetic skyrmion materials, Review, *Rare Metals*, vol 40, pages: 3076-3090, (2021)
- 19) J Leliaert, M Dvornik, J Mulkers, J De Clercq, M V Milosevic, B Van Waeyenberge, Fast micromagnetic simulations on GPU—recent advances made with mumax3, *Journal of Physics D: Applied Physics*, Volume 51, Number 12 (2018)
- 20) M. Hoffmann, G. P. Muller, C. Melcher, S. Blugel, Skyrmion-Antiskyrmion Racetrack Memory in Rank-One DMI Materials, *Frontiers in Physics*, Vol 9, (2021)
- 21) Zhang, X., Ezawa, M. & Zhou, Y. Magnetic skyrmion logic gates: conversion, duplication and merging of skyrmions. *Sci Rep* 5, 9400 (2015).
- 22) L. Exl, D. Suess, T. Schrefl, *Handbook of Magnetism and Magnetic Materials, Micromagnetism*, Springer Nature,(2021)
- 23) Lakshmanan M. 2011The fascinating world of the Landau–Lifshitz–Gilbert equation: an overview *Phil. Trans. R. Soc. A*.3691280–1300
- 24) L. N. Gergidis, C. Tyrpenou, V. D. Stavrou, Magnetic skyrmions in FePt square-based nanoparticles around room-temperature, *J. Phys., Applied Phys.* 56, Department of Materials Science and Engineering, University of Ioannina, Ioannina, GR 45110, Greece, (2023)
- 25) C. Tyrpenou, V. D. Stavrou, L. N. Gergidis, Magnetic skyrmions in FePt square-based nanoparticles around room-temperature, *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol 56, Number 8, (2023)

26) X. Zhang, Y. Zhou, K. M. Song, T.-E. Park, J. Xia, M. Ezawa, X.i Liu, W. Zhao, G. Zhao, S.Woo, Skyrmion-electronics: writing, deleting, reading and processing magnetic skyrmions toward spintronic applications, *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol 32, Number 14, (2020)

27) Schrefl, Thomas & Hrkac, Gino & Bance, Simon & Suess, D. & Ertl, Otmar & Fidler, Josef, *Handbook of Advanced Magnetic Materials*, 1st edition, Springer-Verlag US 2006

29) Birch, M.T., Cortés-Ortuño, D., Turnbull, L.A. et al. Real-space imaging of confined magnetic skyrmion tubes. *Nat Commun* 11, 1726 (2020)

30) Loh, G. C. and Gan, C. K., "Exchange and Dzyaloshinskii-Moriya interactions in bulk FeGe: Effects of atomic vacancies", *AIP Advances*, vol. 7, no. 5, 2017

31) Mumax3 workshop: <https://mumax.ugent.be/mumax3-workshop/>