

Mágneses rend vékonyrétegekben

Tyukodi Botond

Ioan-Augustin Chioar

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika kar, 3. év

Témavezető: dr. Néda Zoltán egyetemi tanár

Tartalom

Kivonat	3
1. Bevezetés	5
2. A kísérlet	
2.1. A kísérleti berendezés	5
2.2. A kísérlet menete, adatfeldolgozás, eredmények	7
3. A modell	11
4. A Monte Carlo szimuláció	
4.1. A Monte Carlo szimulációs módszer 1. - az alapelv	12
4.2. A "részletes egyensúly" (detailed balance) fogalma	13
4.3. A Glauber-dinamika	15
4.4. A Monte Carlo szimulációs módszer 2. - az alap algoritmus	15
4.5. A Monte Carlo szimulációs módszer 3. - a teljes program	16
4.6. Szimulációs eredmények	
4.6.1. A doméniumok kialakulása tiszta kristályban	17
4.6.2. A kristályhibák bevezetése	18
4.6.3. Az első mágnesezési görbe és a hiszterézis	19
5. Következtetések	23
6. Könyvészet	24

Kivonat

Ferrimágneses vékonyrétegek mágnesezési folyamatát és a kialakuló mágneses doméniumok topológiáját, illetve ezeknek a dinamikáját vizsgáljuk kísérletek és számítógépes modellezések által. Ferrimágneses vékonyrétegünk nagy felületi mágneses anizotrópiával rendelkezik, ezért a mágneses doméniumok mágnesezettség-vektora a felületre merőlegesen felfele vagy lefele mutat. A kísérleteinkben egy olyan eszközt használtunk, melyben a ferrimágneses vékonyréteg két párhuzamos polarizációs szűrő között helyezkedik el. A két különböző irányítottágú mágneses doménium, a Faraday hatásnak megfelelően, különböző irányba forgatja a fény polarizációs síkját, így az eszközt fényvel megvilágítva és mikroszkóp alatt vizsgálva láthatóvá válnak a mágneses doméniumok. Ezen doméniumok viselkedését vizsgáltuk változó mágneses térben, a doméniumok mozgását és a rendszer mágneses hiszterézis görbáját követve. A rendszer viselkedését egy skaláris (Ising) spin rendszerrel modelleztük. A mágneses rendért felelős kicserélődési kölcsönhatást, a doméniumok kialakulásáért felelős mágneses dipólus kölcsönhatást és a szennyeződések (kristályhibák) hatását figyelembe véve, Monte-Carlo szimulációs módszerrel tanulmányoztuk a rendszert. A C programozási nyelvben írt szimulációs programunk az általánosan használt Glauber dinamika alapján működik, és az összes kísérletileg tanulmányozott mennyiség és jelenség reprodukálására alkalmas.

A szimulációs eredmények jó egyezést mutatnak a kísérletekkel.

1. Bevezetés

A természetben minden anyag rendelkezik mágneses tulajdonságokkal, azonban ezen tulajdonságok megnyilvánulásának nagyságrendje és típusa más és más az egyes anyagokra. Mágneses anyagoknak mi azokat az anyagokat tekintjük, amelyekben külső mágneses tér hatására számottevő változás megy végbe, azaz kölcsönhatnak a mágneses térrel. Annak függvényében, hogy az anyag hogyan viselkedik külső mágneses térben, a mágneses anyagokat a következő nagy csoportokba oszthatjuk: diamágnesek, paramágnesek, antiferromágnesek, ferromágnesek, ferrimágnesek és spin-üvegek. A továbbiakban a ferromágneses, illetve ferrimágneses anyagokkal foglalkozunk. E két anyag nagyon hasonló tulajdonságokkal rendelkezik, sokáig különbséget sem tudtak tenni közöttük. Egy egyszerű modellt fogunk tekinteni mágneses viselkedésük tanulmányozására, amely mind a mágnesezési görbe hiszterézisét, mind a mágneses momentumok doméniumokba való szerveződését jól magyarázza. Ezen anyagok viselkedése nem csak elméleti szempontból érdekes, de gyakorlati felhasználásuk is széleskörű. Fizikai tulajdonságaik alapján képesek például az információ tárolására, így a mai számítógépek merevlemezeinek az alapját képezik.

Jelen dolgozat keretében ferrimágneses vékonyrétegben kialakuló mágneses doméniumok viselkedését tanulmányozzuk kísérletek és számítógép-szimulációs módszerek alkalmazásával. A ferrimágneses vékonyréteggel végzett kísérleteinkben vizuálisan megfigyelhetők a mágneses doméniumok, illetve ezek dinamikája lassan változó mágneses térben. Digitális képfeldolgozás által lehetőség van a vékonyréteg mágnesezési görbéjének a megszerkesztésére is. Célunk egy olyan szimulációs módszer megvalósítása egy egyszerű modellen keresztül, amely mind a mágnesezési görbét, mind pedig a mágneses doméniumok alakját és ezeknek a dinamikáját helyesen reprodukálja. A vékonyréteget egy egyszerű Ising spinrendszer segítségével modellezzük, a rendszer dinamikáját pedig Monte Carlo szimulációs módszerrel valósítjuk meg.

A dolgozat első részében az általunk tanulmányozott rendszert mutatjuk be, majd a kísérleteinket és ezeknek eredményeit ismertetjük. A dolgozat második részében a jelenségre kidolgozott modellt írjuk le, majd a modell számítógépes tanulmányozásához használt Monte Carlo módszert ismertetjük. A Monte Carlo szimulációk eredményeit a dolgozat harmadik részében mutatjuk be és hasonlítjuk össze a kísérleteink során kapott eredményekkel.

2. A kísérlet

2.1. A kísérleti berendezés

Dr. Kézsmárki István, a Budapesti Műszaki Egyetem docense jóvoltából lehetőségünk nyílt egy kísérletsorozatot elvégezni egy “magnetic bubble apparatus” nevű eszközzel (1. ábra).

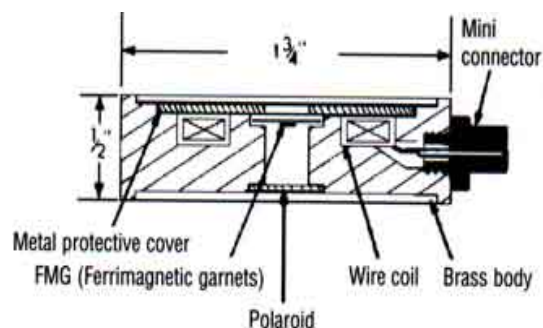
Az eszköz magja egy 8 μm vastagságú ferrimágneses vékonyréteg, konkrétan $\text{Bi}_{0,6}\text{Tm}_{2,4}\text{Ga}_{1,15}\text{Fe}_{3,85}\text{O}_{12}$, melynek a mágneses viselkedését tanulmányozzuk (2. ábra). A vékonyréteg két, elforgatott polárszűrő között helyezkedik el. Az egyik szűrőn áthaladva a fény polarizált lesz, majd a vékonyrétegen áthaladva a Faraday hatás következtében a különböző irányú mágnesezettséggel rendelkező doméniumok különböző irányba forgatják a fény polarizációs síkját. A második polarizációs szűrőre a különböző doméniumokon áthaladt fény polarizációs síkja különböző szögek alatt érkezik, ezért különböző intenzitásokkal halad át. Az eredmény: láthatóvá válnak a mágneses doméniumok. Mivel a vékonyrétegben nagyon erős az anizotrópia, gyakorlatilag csak kétféle, a felületre merőlegesen mutató mágnesezettséggel rendelkező mágneses doménium alakulhat ki. Mikroszkóp alatt vizsgálva az eszközt kb. 100X – os nagyításban, a kétféle doménium sötétebb és világosabb tartományokban nyilvánul meg [1] (3. ábra).

Az eszköz előnye, hogy egy 300 menetes beépített tekercset is tartalmaz, amelynek közepén helyezkedik el a vékonyréteg. A tekercsbe folyó áramot szabályozva, változthatjuk azon mágneses teret, amelyben a próbánk van.

CCD kamera segítségével lehetőségünk van a mikroszkóp által alkotott képet fényképezni, illetve filmezni. A tekercsen átfolyó áramot egy pontos jelgenerátorral különböző alakú (fűrészfog,



1. ábra. A kísérleti eszköz fényképe [1]



2. ábra. A kísérleti eszköz vázlatja [1]



3. ábra. A vékonyréteg fényképe

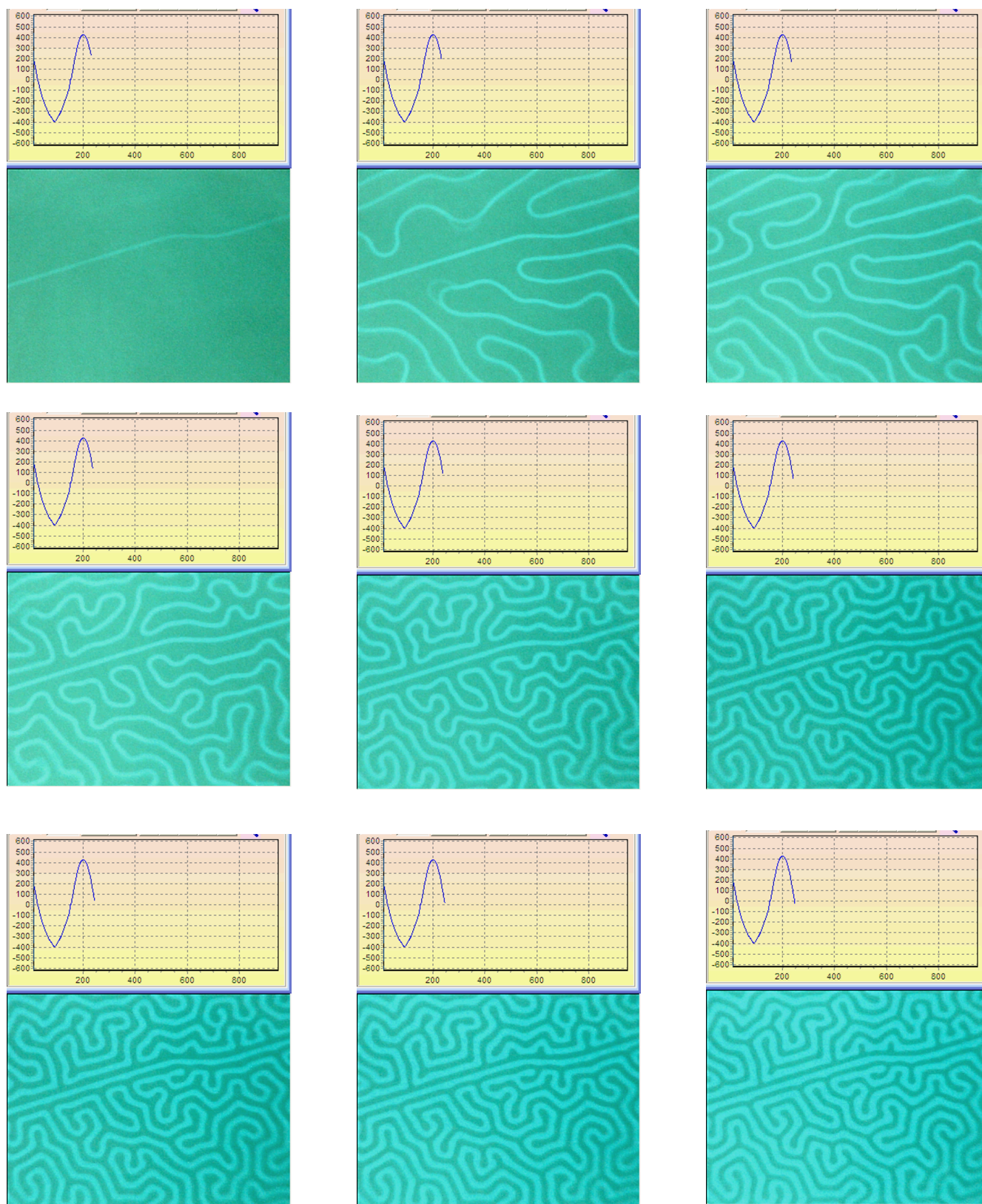
szinuszos), nagy periódusú jellel vezéreltük, és egy RS-232 kapcsolattal rendelkező ampermérővel számítógépen rögzítettük az erősségét.

Célunk a kísérleteink során a ferrimágneses vékonyréteg mágneses viselkedésének tanulmányozása: a mágnesezési hiszterézis görbe és a doméniumok fejlődésének vizsgálata, a doméniumfalak megakadásának, illetve a Barkhausen-zajnak a megfigyelése.

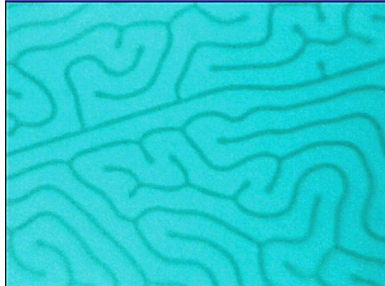
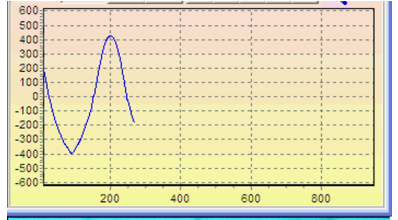
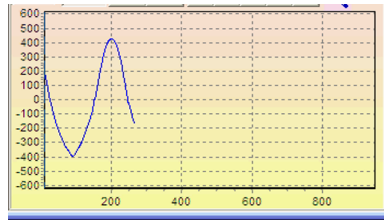
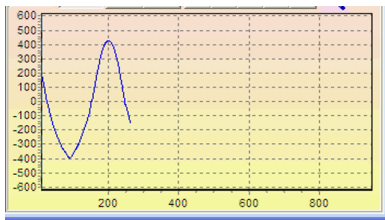
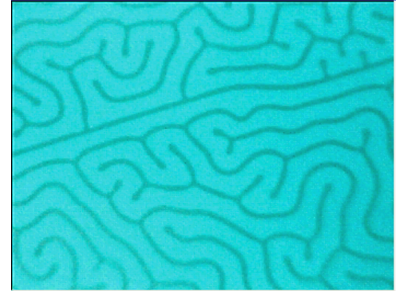
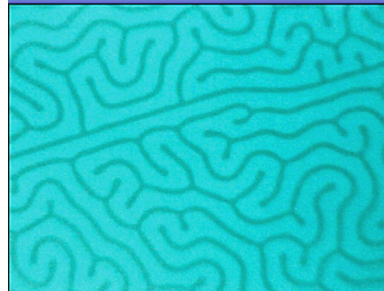
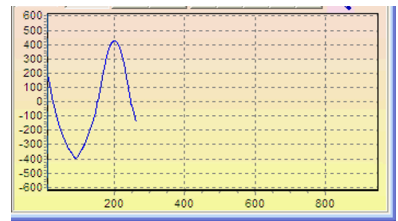
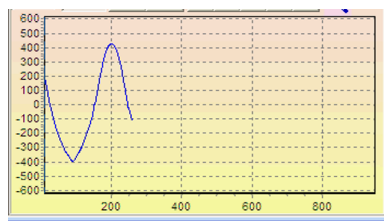
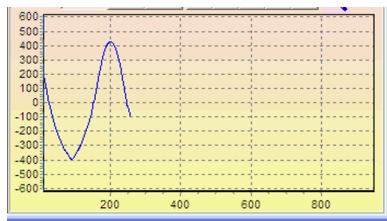
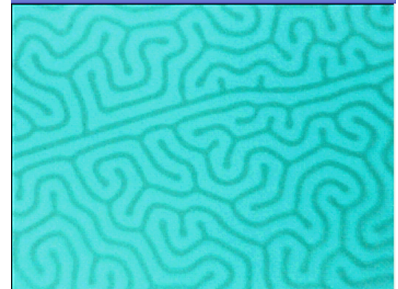
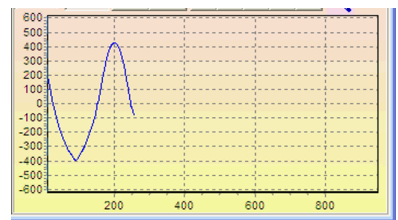
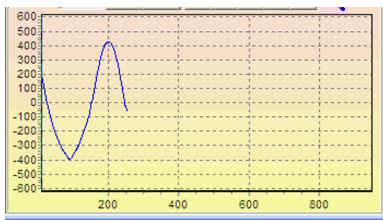
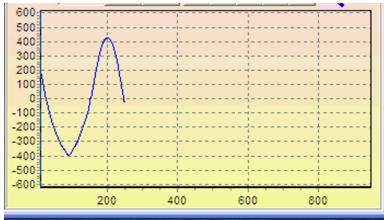
2.2. A kísérlet menete, adatfeldolgozás, eredmények

A mikroszkóp okulárját egy odaillő CCD kamerára cseréltük, így bármikor fényképet vagy filmet tudunk készíteni a mintáról, 640x480 - as felbontással. A jelgenerátorral előbb fűrészfog jelet keltettünk, kb. 20 perces periódussal. Mivel a jel periódusa elég nagy volt, a tekercsben indukált feszültség elhanyagolható. Az áramerősség amplitúdója elég nagy volt ahhoz, hogy a vizsgált vékonyréteg mágnesezés szaturációját okozza. 2 másodpercenként fényképeztük a mintát, és rögzítettük a tekercsen átfolyó áram erősségét, a minta által érzékelt mágneses tér tulajdonképpen ezzel az áramerősséggel arányos.

Több hasonló mérést végeztünk, szinuszos jellel is, illetve filmet is készítettünk néhány mérés során. A kialakuló doméniumok struktúrája minden esetben hasonló: amint az a **4. ábrán** is látható, hosszúkas alakú, folytonos, és hosszú távon át összefüggő doméniumokat kaptunk, nem lehet találni leszakadt, a vele azonos mágnesezettségűtől elszigetelt doméniumot. Az egyes doméniumok vastagsága a mágneses tér változásával változik, mivel az elemi mágneses nyomatékok egyre inkább a külső mágneses tér irányába próbálnak beállni. A felvételeken jól látszik, ahogyan a mágnesezettség változik az alkalmazott mágneses tér függvényében (**4. ábra**), a filmekken pedig látható amint a doméniumok falai a mágnesezési folyamat során megakadnak a kristály hibáin. Megjegyezzük, hogy a képek közötti színárnyalatbeli eltérés a CCD kamerának tulajdonítható, és nem a minta színe változik.

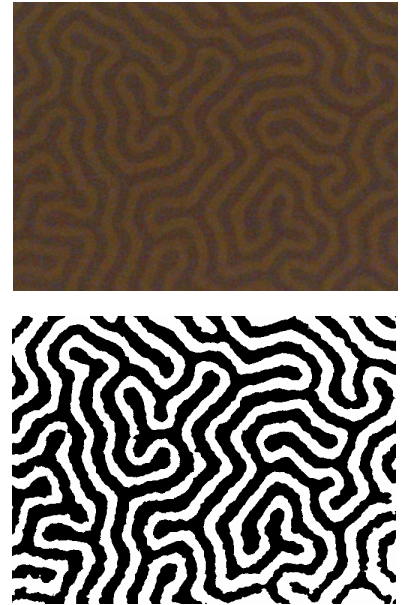


4. ábra. A grafikonon a tekercsen átfolyó áramerősséget ábrázoltuk az idő függvényében, alatta pedig a ferrimágneses vékonyréteg doménszerkezete látható a megfelelő időpillanatban.

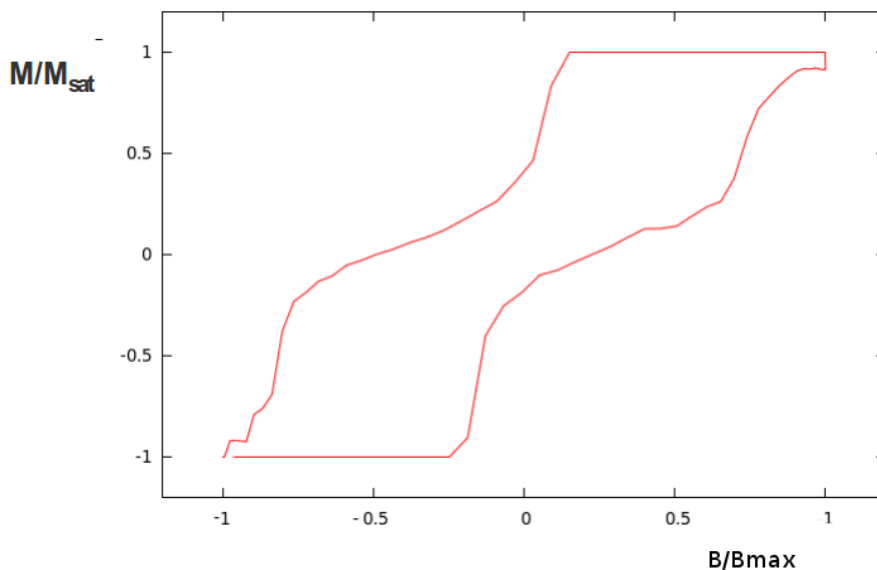


4. ábra-folytatás. A grafikonon a tekercsen átfolyó áramerősséget ábrázoltuk az idő függvényében, alatta pedig a ferrimágneses vékonyréteg doménszerkezete látható a megfelelő időpillanatban.

A fényképeket megfelelően feldolgozva mágnesezettséget lehet számolni: előbb egy zajcsökkentést, majd egy kis elmosást alkalmazva könnyen 1 bites fekete-fehér, pgm formátumú képpé lehet őket alakítani (5. ábra). Az így kapott képfájlok ASCII-fájlként megnyitva, a rövid fejléccet leszámítva csak 0 karakterket illetve a 255 -ös értéket tartalmazzák, a fekete és a fehér képpontoknak megfelelően. A fekete és a fehér pixelek pedig nyilvánvalóan a két különböző irányítottságú mágnesezettségnek felelnek meg, így egy egyszerű C program segítségével, megszámlálva, hogy hány fehér és hány fekete képpont van, megkapjuk az adott fényképnek megfelelő mágnesezettséget. Mivel a fényképekkel együtt az áramerősséget is rögzítjük, megkaphatjuk a vékonyréteg mágnesezési görbéjét (6. ábra). Annak ellenére, hogy a filmekben jól látszanak a Barkhausen-ugrások, ezek nagyságeloszlására sajnos nem tudtunk következtetni, mivel ahhoz túlságosan zajosak és rossz minőségűek voltak a felvételek.



5. ábra. Példa egy feldolgozott képre



6. ábra. Szinuszos jelet használva mért kísérleti hiszterézis: vízszintes tengelyen a maximális indukcióhoz viszonyított indukció, függőleges tengelyen a szaturációs mágnesezettséghez viszonyított mágnesezettség

A rendszer viselkedését egy egyszerű modell segítségével írjuk le, amely a számítógépes szimulációnk alapját képezi.

3. A modell

Annak ellenére, hogy a valóságban ferrimágneses anyaggal dolgoztunk, a vékonyréteget egy egyszerű Ising-moddellel [2] közelítjük meg. A ferrimágnes mezoszkopikus darabkái az Ising-modell egy-egy spinjének felelnek meg, és mivel jóval a kritikus hőmérséklet alatt dolgoztunk, egy ilyen darabka spinjének a moduluszát úgy tekintjük, hogy nem változik jelentős mértékben.

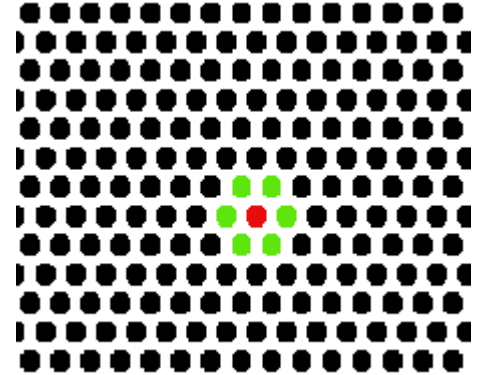
A spineket síkban, egy rétegben, egy hatszög rácson helyezük el (7. ábra) azért, mert így szorosabban helyezkednek el, mint ha négyzet rácson volnának, és így közelebb állnak a folytonos réteghez, ugyanakkor ilyen módon a mágneses doméniumok falai is többféle szöget zárhatnak be (szabadabb doménium-topológiát vagy jobb izotrópiát teszünk lehetővé). A spineknek két állapotot engedünk meg, a síkra merőleges két irányban, mivel a vizsgált vékonyrétegben nagyon erős mágneses anizotrópia létezik és a mágneses doméniumoknak ezért csak két lehetséges iránya van. A rendszer Hamilton-függvényébe így már nem kerül be az anizotrópiából származó energia, ehelyett a spineknek csak az említett két állapotot engedjük meg. A szomszédos doméniumok közti kicserélődési kölcsönhatást, a mágneses dipolus kölcsönhatást és a külső mágneses térrel való kölcsönhatást tekintve az első lépésben a rendszer teljes Hamilton-függvénye [3]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{\{i,j\}} \frac{S_i S_j}{r_{ij}^3} - B \sum_{\{j\}} S_j, \quad 3.1$$

ahol S_j a j . atom spinje (értéke +1 vagy -1), J és D a kicserélődési illetve a dipoláris kölcsönhatásnak megfelelő állandók.

Az első tag a kicserélődési kölcsönhatásból származik, és a kölcsönhatás kis hatótávolsága miatt az összeg csak a szomszédokra vonatkozik. Ez a tag pozitív J esetén a spinek párhuzamos orientációját próbálja megvalósítani. A második tag a dipoláris kölcsönhatás, ez bármely két spin között fellép, és antiparallel módon próbálja őket irányítani. A harmadik tag a külső mágneses térrel való kölcsönhatásból származó energia, és ez akkor lesz minimális, ha a spinek a mágneses tér irányába állnak be.

A fenti Hamilton függvény azonban még nem teljes, mivel nem tartalmazza a kristályrácshibáival való kölcsönhatást, ennek hiányában azonban a mágneses doméniumok falai folytonosan mozognak és nem akadnak meg a rácshibákon, vagyis a mágnesezettség nem fog hiszterézist mutatni.



7. ábra. A spinek egy hatszög rácson: a pirossal jelölt spin a kicserélődési kölcsönhatás révén csak a zöldekkel hat kölcsön

Ahhoz, hogy a falak megakadása (“domain wall pinning”) megjelenjen és hiszterézis görbénk legyen, újabb tag hozzáadása lesz szükséges a Hamilton-függvényhez.

A Hamilton-függvény ismeretében elvileg a statisztikus fizika klasszikus módszereit alkalmazva vizsgálhatnánk a rendszert, azonban komplikált kölcsönható rendszerről lévén szó, közelítések alkalmazása nélkül ez nem egy kivitelezhető megoldás. A rendszer dinamikus és egyensúlyi tanulmányozásának egyik legkönnyebb módja a Monte Carlo típusú számítógépes szimulációk.

4. A Monte Carlo szimuláció

4.1. A Monte Carlo szimulációs módszer 1. - az alapelv

A rendszer állapotterében a mikroállapotok diszkrétan helyezkednek el, mivel egy mikroállapot egy adott spin-konfigurációt jelent, és Ising-modellről lévén szó, az egyes spineknek csak két, diszkrét állapota lehetséges. Így statisztikus fizikai megfontolások alapján a rendszer i . mikroállapotának az előfordulási valószínűsége [4]:

$$P_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_i}, \quad 4.1$$

ahol $\beta = \frac{1}{kT}$, H_i az adott mikroállapot energiája, Z pedig a rendszer kanonikus partíciófüggvénye.

Célunk a rendszer összmágnesezettségének a meghatározása, ehhez pedig az alábbi összeget kell kiszámolnunk:

$$\langle M \rangle = \sum_i P_i M_i, \quad 4.2$$

ahol M_i az i . mikroállapotban a rendszer mágnesezettsége. A megoldás korántsem triviális, mivel egy n^2 elemből álló rendszer esetén a mikroállapotok száma 2^{n^2} , és a partíciófüggvény és az egyes állapotok valószínűségeinek a kiszámításához minden mikroállapotban ki kellene számítani az energiát. Amint azt már előrebocsájtottuk, a nehézséget végeredményben az okozza, hogy a rendszer elemei nem függetlenek egymástól: kölcsönhatnak, emiatt nem elegendő egyetlen részecske partíciófüggvényét kiszámítani.

A megoldás az, hogy nem a fenti összeget számítjuk ki, hanem a karakterisztikus pont mozgását szimuláljuk az állapotterben: úgy lépkedünk az egyes mikroállapotok között, hogy sok lépés után mindegyiknek az előfordulási valószínűsége megegyezzen a valós, 4.1 előfordulási valószínűséggel. Feltételezzük, hogy az állapotterben csak szomszédos állapotok között van közvetlen átmenet (ez azt jelenti, hogy két, egymást követő állapot között legfeljebb csak egy spin mágneses nyomatékának az

irányítása különbözik). Az indoklás az, hogy bár az állapottér nem folytonos, a karakterisztikus pont nem “ugrál” az állapottérben (egyszerre egy spin fordulhat meg).

Miközben a fent említett módon járjuk be az egyes mikroállapotokat, minden mikroállapotban kiszámítjuk a mágnesezettséget, majd ezekből átlagot számolunk:

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_{\text{a bejárt állapotokra}} M_i}{\text{bejárt állapotok száma}} \quad 4.3$$

Egy ilyen módszer előnye, hogy a valószínűbb állapotokon megy keresztül többször, és a kevésbé valószínű állapotokat kerüli: így ezek kevésbé járulnak csak hozzá a mágnesezettség átlagértékéhez, pont úgy, mint az eredeti összegben, viszont itt nem kell legenerálni minden egyes állapotot, hogy megkapjuk az egyes előfordulási valószínűségeket, mivel ezek kiszámítása nélkül oldjuk meg a feladatot. Ehelyett azonban egy másik probléma merül fel: egy adott mikroállapotból kiindulva milyen valószínűségekkel kell a szomszédos mikroállapotok valamelyikébe ugrani ahhoz, hogy sok számú ugrás után az egyes mikroállapotok előfordulási valószínűsége a 4.1 legyen? Keressük tehát a mikroállapotok közötti átmeneti valószínűségeket.

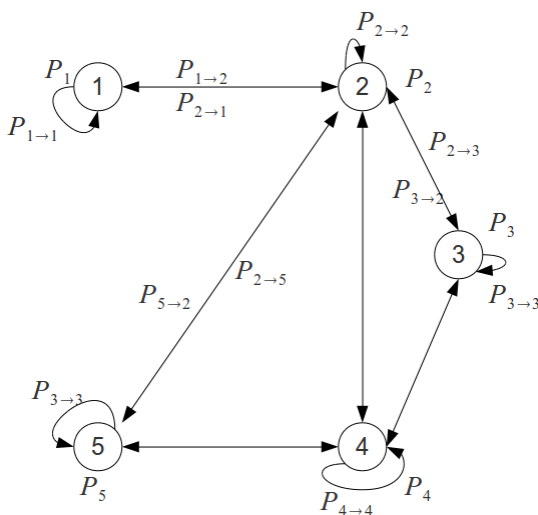
4.2. A “részletes egyensúly” (detailed balance) fogalma

A fent leírt folyamat egy Markov-folyamat [9]. Lényegében egy gráf csomópontjait járjuk be, úgy, hogy az egyes éleken mindkét irányba lerögzítjük az átmeneti valószínűségeket. A gráf csomópontjai az állapottér pontjai (a mikroállapotok) lesznek, és egy időpillanatban ezek valamelyikében tartózkodik a karakterisztikus pont (8. ábra).

Vizsgáljuk meg első lépésben, mi történik termodinamikai egyensúlyban egy ilyen gráfon. Az egyensúlyra az jellemző, hogy a termodinamikai állapothatározók (és ezáltal az állapotfüggvények)

átlagértéke nem változik időben, ehhez viszont az szükséges, hogy az egyes mikroállapotok előfordulási valószínűségei is időben állandók legyenek, hiszen ezek a valószínűségek határozzák meg a makroszkopikus mennyiségek átlagértékét.

Képzeljünk el nagy számú replikát (másolatot) a gráfból, amely a rendszerünket jelképezi.



8. ábra. Az állapottérrel jelképező gráf

Mindegyik másolatnak egy adott csomópontjában van a saját karakterisztikus pontja, egyensúlyban pedig annak az eloszlása, hogy hány replika karakterisztikus pontja van az egyes másolatok adott csomópontjában (hány van az 1-es, 2-es, stb. mikroállapotokban), a 4.1 Boltzmann eloszlás kell legyen. Mivel mindegyik másolat termodinamikai egyensúlyban van, az egyes állapotok előfordulási valószínűsége nem változik. Ez csak úgy fordulhat elő, ha egy adott csomópontba ugyanannyi replika karakterisztikus pontja lép be, mint ahány kilép belőle, és ez igaz kell legyen bármely csomópontra. Matematikai alakban ez a megállapítás a következő alakban írható az i . csomópontra [5]:

$$\sum_{\{j\}} P_j P_{j \rightarrow i} = \sum_{\{j\}} P_i P_{i \rightarrow j} \quad , \quad \mathbf{4.4}$$

ahol P_j a j . mikroállapot előfordulási valószínűsége, $P_{j \rightarrow i}$ pedig a $j \rightarrow i$ átmenet valószínűsége. Mivel diszkrét időlépésekkel dolgozunk, ez annak a valószínűsége, hogy a karakterisztikus pont az adott időlépésben a j . állapotból az i . állapotba menjen. Az összegzés az összes olyan csomópontra vonatkozik, amelyből megengedett az átmenet az i . pontba, illetve visszafele. Belátható, hogy ha a 4.4 feltétel teljesül, akkor a rendszer nemcsak, hogy egyensúlyban van, de egyensúlyban is marad, mivel innentől kezdve nem változnak az állapotok valószínűségei.

Nyilvánvaló tehát, hogy az átmeneti valószínűségeket úgy kell megválasztanunk, hogy egyensúlyban kielégítsék a 4.4 feltételt. Ez azonban még nem teljesen elegendő: bármilyen kezdeti valószínűség-eloszlásból kiindulva elegendő idő elteltével az egyensúlyi eloszláshoz kell jutnunk (mivel a valóságban is minden rendszer a termodinamikai egyensúlyra törekszik). Bizonyítható, hogy amennyiben az átmeneti valószínűségek egyensúlyban eleget tesznek a 4.4 feltételnek, akkor bármilyen kezdeti valószínűség-eloszlásból kiindulva a mindenkori valószínűség-eloszlás az egyensúlyi eloszláshoz fog konvergálni [11]. Másszóval, ha az egyensúly létrejöhét, akkor az létre is jön.

A 4.4 feltétel egy globális mérlege az i . csomópontnak, és szükséges és elégséges feltétele az egyensúly kialakulásának, azonban meglehetősen kényelmetlen egy ilyen feltétellel dolgozni. N. Metropolis [6] azt javasolta, hogy dolgozzunk ehelyett egy erősebb (egy elégséges, de nem szükséges) feltétellel, amely ugyancsak biztosítja a valószínűség-eloszlás invarianciáját, viszont lényegesen könnyebb vele dolgozni. A feltétel egy “részletes mérleg” (detailed balance), vagyis azt követeljük meg, hogy egyensúlyban ahány replika i .-ből j .-be vált, ugyanannyi váltson j .-ből i .-be, azaz:

$$P_j P_{j \rightarrow i} = P_i P_{i \rightarrow j} \quad \mathbf{4.5}$$

Természetesen ha olyan átmeneti valószínűségeket találunk, amelyek a 4.5 feltételt teljesítik, azok a 4.4.-et is fogják, és így bármilyen kezdeti valószínűség-eloszlásból kiindulva a rendszer az egyensúly fele tart.

Szükséges azonban megjegyezni, hogy az átmeneti valószínűségek megválasztása nem

egyértelmű: többféle megválasztás is vezethet az egyensúlyi állapothoz.

4.3. A Glauber dinamika

Belátható, hogy az átmeneti valószínűségek egyik lehetséges megválasztása [7]:

$$P_{i \rightarrow j} = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_j - E_i}{kT}}}, \quad 4.6$$

mivel egy ilyen megválasztás kielégíti a 4.5 feltételt:

$$\frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i}{kT}} \frac{1}{1 + e^{\frac{E_i - E_j}{kT}}} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_j}{kT}} \frac{1}{1 + e^{\frac{E_j - E_i}{kT}}}$$

Ezen megválasztás szerinti léptetés az úgynevezett Glauber-dinamika alapja.

Már említettük, hogy amennyiben az átmeneti valószínűségek eleget tesznek a 4.5 feltételnek, a rendszerünk az egyensúly fele tart, és miután elérte (a rendszer termalizálódott), az egyes mikroállapotok valószínűségei már nem változnak, ezért inentől kezdve el lehet kezdeni átlagokat számolni úgy, hogy a megfelelő átmeneti valószínűségekkel lépkedünk a különböző mikroállapotok között, és minden mikroállapotban kiszámítjuk a keresett mennyiséget (pl. energiát), majd elég nagy számú lépés során átlagoljuk az értékét. Az egyes értékek előfordulási valószínűségét (a helyes statisztikai súlyokat) már az algoritmus biztosítja.

Nyilvánvalóan a modellünkben a rendszer időbeli változása nem a valós változás lesz, egyrészt, mert valószínűségekkel dolgozunk, másrészt, mert nem ismerjük az átmeneti valószínűségek valódi értékét (ezeket meglehetősen önkényesen választottuk meg). Átlagok számítására természetesen minden további nélkül alkalmazható a módszer, a kérdés azonban az, hogy szimulálhatunk-e így egy valóság-hű dinamikát? Ma úgy hiszik (bár ez még nem bizonyított), hogy a Glauber-dinamika közel áll a rendszer valóságos dinamikájához [8]. Nem tudjuk, hogy a Glauber-dinamika időléptéke milyen kapcsolatban áll a valós idővel, azonban esetünkben ez nem is játszik fontos szerepet.

Célunk tehát a bemutatott vékonyréteg viselkedésének szimulációja változó mágneses térben, Glauber-dinamikát alkalmazva.

4.4. A Monte Carlo szimulációs módszer 2. – az alap algoritmus

A fent említett teljes gondolatmenet valószínűségi alapokon nyugszik, így a szimulációt is valószínűségekre kell alapoznunk. Nem lesz tehát egy determinisztikus változása a rendszernek, ezért ez a fajta szimuláció az úgynevezett Monte-Carlo szimulációk csoportjába tartozik. Monte-Carlo típusú

szimulációnak nevezünk tulajdonképpen minden olyan szimulációt, amelyben egy adott esemény (esetünkben például egy spin megfordulása) bizonyos valószínűséggel megy végbe, sosem tudjuk biztosra, hogy a következő esemény végbemegy-e. Azt, hogy egy esemény az általunk kívánt valószínűséggel játszódjon le, véletlen számok generálásával tudjuk megvalósítani.

A fentiek alapján az algoritmus igen kézenfekvő [10]:

1. kiindulunk egy kezdeti spin-konfigurációból
2. kiszámítjuk a rendszer energiáját (E_1)
3. találmra kiválasztunk egy spint (dobunk egy egyenletes eloszlású véletlenszámot)
4. kiszámítjuk, mekkora volna a rendszer energiája, ha a spint megforgatnánk (E_2)
5. dobunk egy egyenletes eloszlású véletlenszámot a (0,1) intervallumból
6. ha ez nagyobb mint $P_{1 \rightarrow 2} = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_2 - E_1}{kT}}}$, akkor a spint nem fordítjuk meg, ellenkező esetben megfordítjuk és $E_1 := E_2$
7. tovább megyünk a 3. lépéshez

Valójában a Markov-folyamatot valósítjuk meg a bemutatott Ising-rendszerre alkalmazva: mivel a spineket egyenletes eloszlású véletlenszámmal választjuk ki, a rendszer bármely szomszédos mikroállapotába egyforma valószínűséggel mehetne át (ez tehát nem befolyásolja az átmeneti valószínűségeket, viszont segít kiszűrni a determinisztikus jelleget). Az átmeneti valószínűségeket a 6. lépésnél szabályozzuk, vagyis bármely két szomszédos átmenet között a Glauber-dinamikának megfelelő átmeneti valószínűséget valósítunk meg. A 7. lépés előtt ki lehet számolni más mennyiségeket is, amelyeknek az átlagára kíváncsiak vagyunk, például a rendszer mágnesezettségét.

Ily módon a rendszernek egy valóságyszerű dinamikáját szeretnénk megvalósítani.

4.5. A Monte Carlo szimulációs módszer 3. – a teljes program

A szimulációs programunk C nyelvben íródott, és a Glauber dinamikát implementálja a bemutatott modellünkön. A program külön függvényeket alkalmaz a rendszer kezdeti energiája, és mindenkor energiája kiszámítására: a kezdeti energiát egyszer számítjuk ki (ekkor minden spinen végig kell menni, számolni a kicserélődési kölcsönhatást a szomszédokkal, a dipolárist pedig az összes többi spinnel), míg a mindenkor energiát minden spin-fordítás után ki kell számítani, azonban ez

gyorsabban megy: ha csak egyetlen spin irányítása változott meg, elegendő ezen spin többivel való kölcsönhatását újraszámolni, és a forgatás előtti teljes energia ismeretében megkapható a forgatás utáni teljes energia. Egy másik függvény a fent részletezett Glauber-dinamika algoritmusának a 4-7. lépéseit valósítja meg, tulajdonképpen ezt a függvényt minden találomra kiválasztott spinre meg kell hívni.

A rendszert előbb inicializálni kell, ami abban áll, hogy rögzítünk egy kezdeti spin-konfigurációt, és kiszámítjuk az ennek a konfigurációnak megfelelő energia és mágnesezettség értékeit. Ezek után a rendszert termalizálnunk kell: addig alkalmazzuk rá a Glauber-dinamikát, míg az egyes mikroállapotok előfordulási valószínűségei nem változnak és megegyeznek az adott hőmérsékletnek megfelelő egyensúlyi valószínűségekkel. Ez után tovább alkalmazzuk a Glauber-dinamikát (a 3-7. lépéseket), azonban mostmár elkezdhetünk átlagokat számolni (pl. mágnesezettség), mivel az előfordulási valószínűségek már nem változnak. Sok ilyen léptetés után az átlagoknak konvergálnia kell az egyensúlyi átlagértékekhez. Közben növelve vagy csökkentve a külső mágneses teret, minden mágneses térre megkaphatjuk a mágnesezettséget, így felvehetjük a mágnesezési görbét. Megjegyezzük, hogy a mágneses tér (folytonosnak szánt) változtatása után nem termalizáljuk még egyszer a rendszert, mivel a rendszer dinamikájára vagyunk kíváncsiak. A végesméret-effektus csökkentése érdekében periodikus határfeltételeket alkalmaztunk a rendszerünk minden szélére, gyakorlatilag egy tóruszá csuktuk össze a rendszert.

A program egy X11 alatti grafikus könyvtárat is használ, ez lehetővé teszi a spinek konfigurációjának a kirajzolását a szimuláció közben: ha egy spin lefele áll, fekete korongot, ha felfele áll, fehér korongot rajzolunk a neki a rácson megfelelő pozícióba. Így a program nagy előnye, hogy a szokványos átlag-számítások mellett a spinek rendeződése, és a rendszer dinamikája vizuálisan is megfigyelhető.

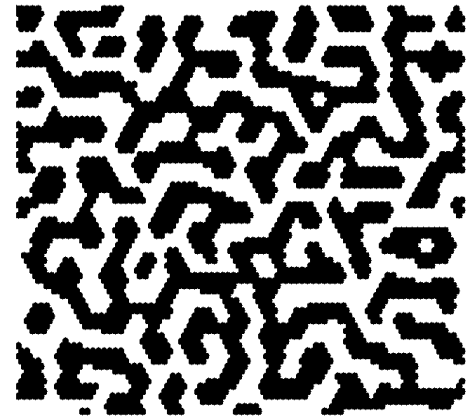
4.6. Szimulációs eredmények

4.6.1. A doméniumok kialakulása tiszta (kristályhibáktól mentes) kristályban

A programunk segítségével a bemutatott kísérletben megfigyelt mágneses doméniumok kialakulását szimuláljuk. Külső mágneses tér hiányában a doméniumok kialakulása a spinek közti kicserélődési és dipoláris kölcsönhatás együttesének az eredménye, amint az a 3.1 Hamilton-függvény alakjából is látszik. Amennyiben ezen két kölcsönhatás mértéke összemérhető, kialakulnak a doméniumok. Ha a kritikus hőmérséklet alatt futtatjuk a programot, az ismertett algoritmusnak megfelelően az egyensúlyi állapotban a rendszer mágnesezettsége nulla lesz a két ellentétes irányítású doméniumok megjelenése miatt. Ebben az esetben a kétféle doméniumnak megfelelő területek

nagysága egyforma, és ez a dipoláris kölcsönhatás jelenlétének tulajdonítható (9. ábra).

Külső mágneses tér alkalmazása esetén megjelenik a Zeeman hatás, vagyis a 3.1 Hamilton függvényben az utolsó tag annál nagyobb szerepet játszik, minél nagyobb a mágneses tér. Ennek megfelelően a spineknek energetikai szempontból azok az állapotok kezdenek kedvezőek lenni, amelyekben a tér irányával párhuzamosan állnak be, emiatt a tér irányába álló mágnesezettséggel rendelkező doméniumok nőni fognak, vagyis a doméniumok falai a megfelelő irányba mozdulnak el. Érdekes összehasonlítani az így kialakuló doméniumok struktúráját a vékonyrétegről készült fényképekkel (4. ábra).



9. ábra. A mágneses doméniumok külső tér hiányában, 80x80-as rácson

Annak ellenére, hogy a mágneses tér növelésekor a figyelembe vett kölcsönhatások már egy valóságoszerű dinamikát szolgáltat, illetve biztosítja a doméniumok kialakulását és megfelelő topológiájukat, egy komoly probléma merül fel, ha közelebbről megvizsgáljuk a rendszer dinamikáját: a kísérlettel ellentétben a mágnesezési görbének nem lesz hiszterézise. Célunk tehát a modellünk átalakítása úgy, hogy az így megvalósított doménium-struktúrák megmaradjanak, ugyanakkor a mágnesezési görbe a valóságnak megfelelő hiszterézist mutasson.

4.6.2. A kristályhibák bevezetése

Mint ismeretes, a mágnesezési görbe hiszteréziséért a kristályban jelenlévő kristályhibák és szennyeződések a felelősek. Amint azt láttuk, változó mágneses térben a tér irányával megegyező mágnesezettségű doméniumok úgy nőnek, hogy a doméniumfalak a megfelelő irányba mozdulnak el. A valóságban azonban a kristályhibákhoz érve a doméniumfalak megakadnak, mivel egy ilyen állapot egy lokális energiaminimummal rendelkezik. A doméniumfal csak akkor halad tovább, ha a mágneses tér elegendően erős ahhoz, hogy ebből az energiaminimumból kimozdítsa. Ez a jelenség az úgynevezett “pinning”, és ez felelős a mágnesezési görbe hiszteréziséért, mivel úgy a doménium növekedésekor, mint a csökkenésekor megakasztja a doménium falát, így növekedéskor a hibák nélküli mágneses térnél nagyobb, míg csökkenéskor egy ennél kisebb mágneses térnél ugrik át a doméniumfal a kristályhibán.

Ahhoz, hogy a jelenséget szimuláljuk, ismernünk kellene modellünk spinjeinek a kristályhibákkal való kölcsönhatási energiáját, azonban ezt nem ismerjük, ezért kissé fenomenologikusan kell megközelítenünk a problémát. Amit tudunk a kölcsönhatásról az, hogy a kristályhiba megakasztja a doméniumfalat és pinninget okoz, ha találkozik vele, illetve, hogy semmi

hatása nincs, ha már a doménium belsejében található (például a fal már túlugrott rajta).

A kristályhibákat úgy tekintjük, mint hiányzó (azaz 0 értékű) spineket a hatszögrácsról, így a Hamilton-függvényben szereplő eddigi tagokat nem fogják befolyásolni. A hibákat taláломra szórjuk szét a rácson viszonylag kis sűrűséggel, mivel a valóságban is többnyire véletlenszerűen helyezkednek el. Egy ilyen hibának csakúgy, mint a többi spinnek 6 szomszédja lesz, és annál inkább meg kell akassza a doménium falát, minél “különbözőbb” a körülötte lévő spinek irányítása: ha mindegyik egyirányú, akkor nyilvánvalóan a hiba már a doménium belsejében van, és ekkor már nincs hatással a fal mozgására, viszont ha például 3-3 spin áll az egyes irányokba, ez már egy éppen odaérkező doméniumfalat jelent, és ezt erőteljesen blokkolni kell.

Az említett hatásokat egyszerűen be tudjuk építeni a modellbe, amennyiben a Hamilton-függvényhez még egy tagot adunk hozzá:

$$H_{\text{pinning}} = - \sum_{\{i\}} C_i (6 - |\sum_{\langle j \rangle} S_j|) , \quad 4.7$$

ahol C_i egy pozitív állandó (ami nulla ha az adott rácspontban nincs hibánk), az első összegzés minden rácspontra, a második összegzés meg minden rácspont első szomszéd (a mi esetünkben 6 darab) rácspontjára vonatkozik. A C állandót úgy kell megválasztani, hogy a hibákkal való kölcsönhatásból származó tag összemérhető legyen a Hamilton-függvény többi tagjával. Látható, hogy a 4.7 tag 0, ha a szomszédok irányítása megegyezik, és maximális, ha 3-3 spin áll a két irányba. Így a rendszer teljes Hamilton-függvénye nyilvánvalóan:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{\{i,j\}} \frac{S_i S_j}{r_{ij}^3} - B \sum_{\{i\}} S_i - \sum_{\{i\}} C_i (6 - |\sum_{\langle j \rangle} S_j|) \quad 4.8$$

lesz.

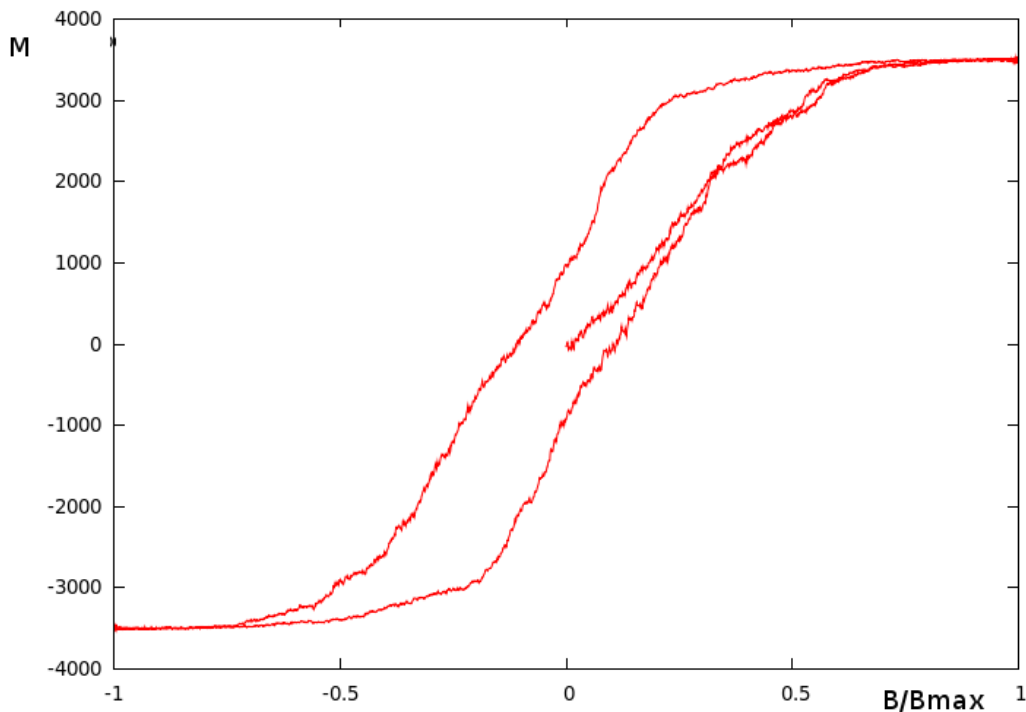
A hibák bevezetésének köszönhetően a doméniumfalak már nem egyenletesen mozognak majd, hanem megakadnak a kristályhibákon, amely a hiszterézis viselkedést okozza. A továbbiakban az erre vonatkozó konkrét szimulációs eredményeket ismertetjük.

4.6.3. Az első mágnesezési görbe és a hiszterézis

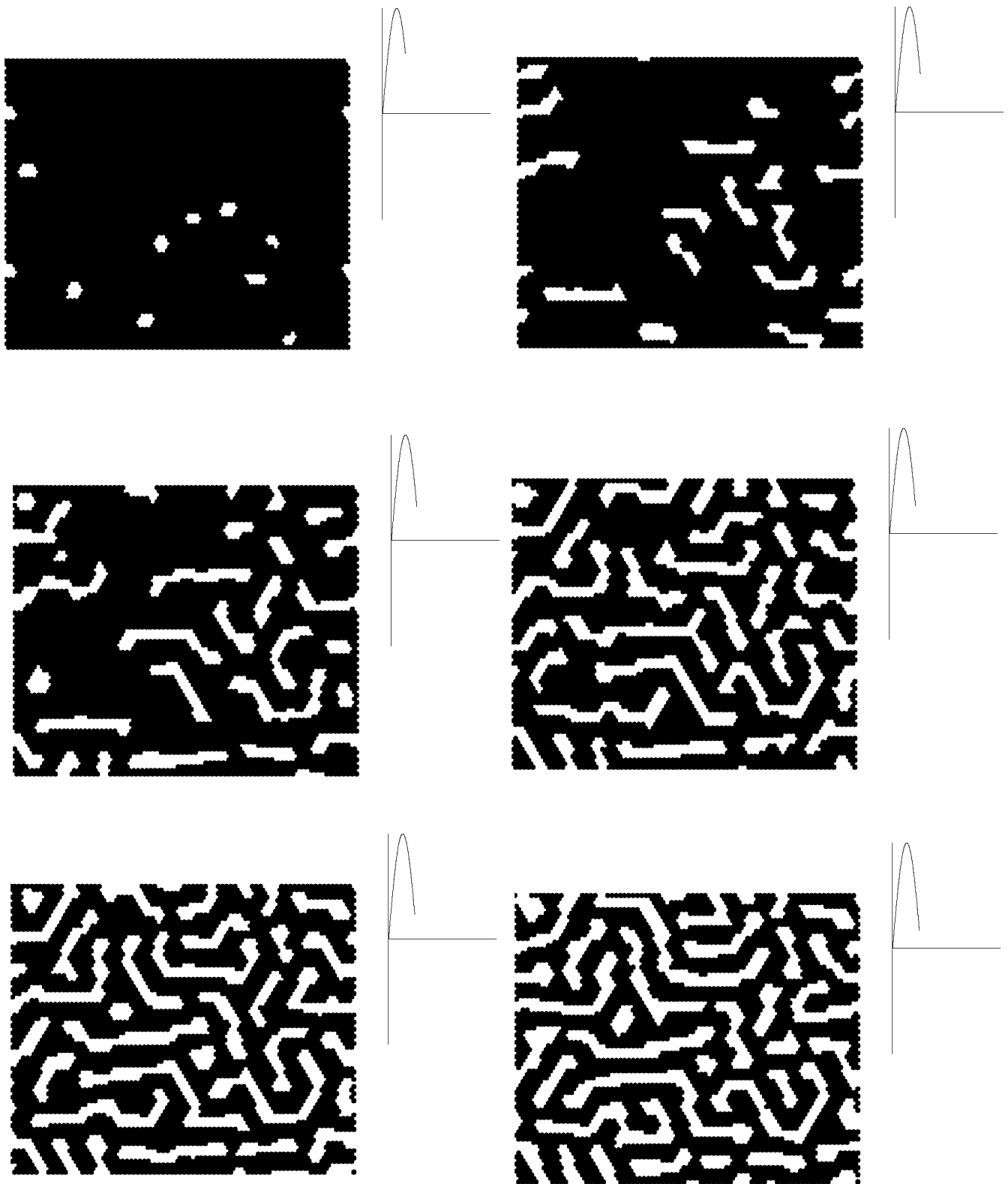
A 4.8 - as Hamilton-függvénnyel dolgozva többek között egy 60x60 spinből álló (a hibákat is beleértve) háromszögrácson 100, véletlenszerűen szétszórta hibával, a kísérlettel megegyező szinuszosan változó mágneses tér alkalmazásával futtattuk a már bemutatott Monte-Carlo szimulációs programot a mágnesezési görbe kirajzolásához, illetve 10 hibával a doméniumok topológiájának vizsgálatához.

A **10. ábrán** jól látható a hiszterézis görbe. Megfigyelhető az első mágnesezési görbe, a remanens mágnesezettség, illetve a koercitív mágneses tér. A **11. ábrán** pedig a **4. ábrának** megfelelő doméniumok topológiájának a változása látható az egyik irányú telítődéstől a másik irányú telítődésig. A grafikán nem jelöltük külön a kristályhibákat, mivel a rendszer méretéhez képest ezekből úgyszólván kevés van, fehér korongként jelennek meg akár csak a lefele álló mágneses doméniumok.

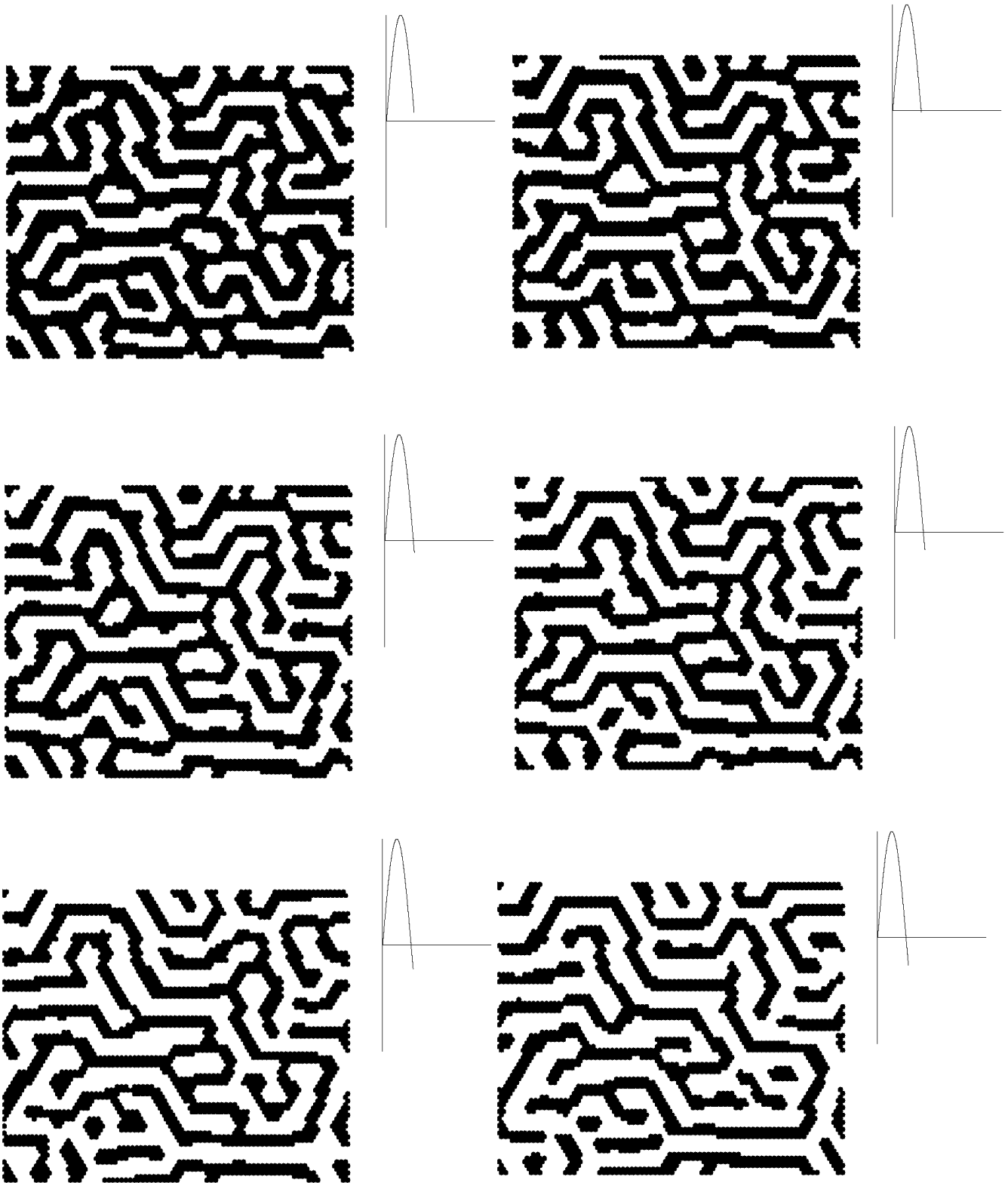
Megjegyezzük, hogy az így kapott doménium struktúra továbbra is nagyon hasonlít a kísérletben észlelt struktúrához, ugyanakkor a rendszer dinamikája a hibák bevezetésével jelentősen megváltozott.



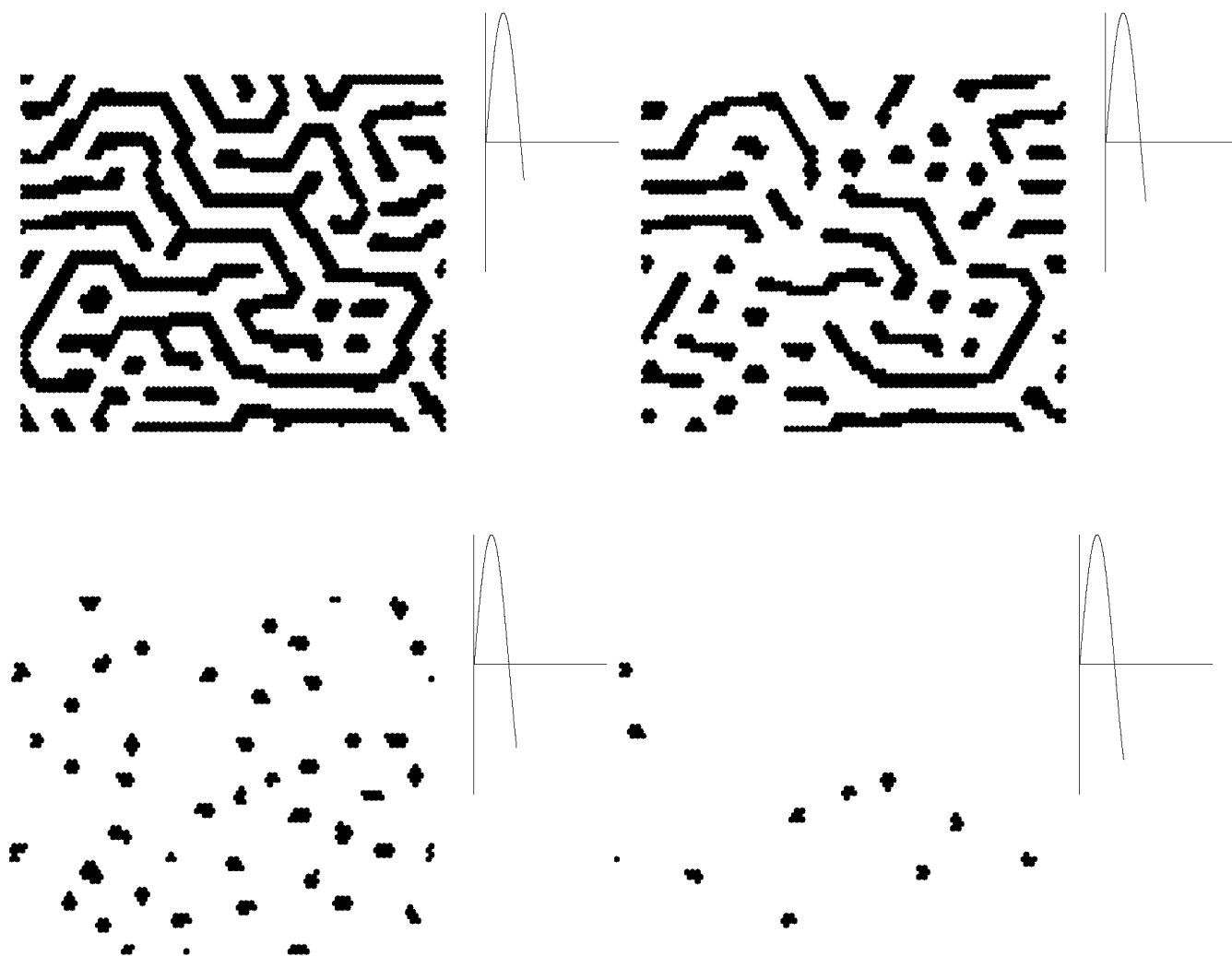
10. ábra. A szimulációból számolt hiszterézis, 60x60-as rácson, 100 hibával. A függőleges tengelyen az egyik irányba álló spinek száma látható, ezzel arányos a mágnesezettség



11. ábra. A doméniumok változása, 80x80-as rácson, 50 hibával. A grafikonon a mágneses tér látható az idő függvényében



11. ábra- folytatás. A doméniumok változása, 80x80-as rácson, 50 hibával. A grafikonon a mágneses tér látható az idő függvényében



11. ábra- folytatás. A doméniumok változása, 80x80-as rácson, 50 hibával. A grafikonon a mágneses tér látható az idő függvényében

5. Következtetések

Az általunk tanulmányozott ferrimágneses vékonyréteg doméniumainak egy valóságoszerű dinamikáját sikerült megvalósítanunk, egy egyszerű modellt véve alapul. Szimulációnk sikeressége alátámasztja azt a feltevést, mely szerint a Glauber-dinamika nem csak átlagszámításra, hanem a rendszer dinamikájának a leírására is alkalmas.

A vékonyréteg szimulációjára használt Monte-Carlo módszer ugyanakkor a széles körben alkalmazott mikromágneses szimulációkkal ellentétben egyszerű modellen alapszik, könnyen megérthető és implementálható.

6. Könyvészet

- [1] http://www.telatomic.com/electricity/magnetic_bubble.html
- [2] Ralph Skomski, Simple Models of Magnetism, Oxford University Press, (2008)
- [3] S. Borbély, Z. Néda, S. Pinteá, L. Rednic, C. Tanaselia, Phase-diagram of a two-dimensional magnetic monolayer nanostructure, preprint, (2007)
- [4] Pathria, R. K., Statistical Mechanics, Butterworth Heineman, (1996)
- [5] Binder K., Heermann D.W., Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction (4th edition), Springer, (2002)
- [6] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys., **21**, 1087, (1953)
- [7] R.J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294, (1963)
- [8] Kwan-tai Leung, Zoltó Néda, Physics Letters A **246**, 505-510, (1998)
- [9] W. R. Gilks, Walter R. Gilks, Markov chain Monte Carlo in practice, London: Chapman & Hall, (1996)
- [10] K. Binder, Rep. Prog. Phys. **60**, 487–559, (1997)
- [11] Onuttom Narayan: Convergence of Monte Carlo simulations to equilibrium, Phys. Rev. E **64**, 021104, (2001)