الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Université Larbi Tébessi -Tébessa

كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة

قسم: علوم المادة

فرع: الفيزياء اختصاص: فيزياء المادة المكثفة

مذكرة ماستر حول:

تحاكي Monte-Carlo للمعادن الانتقالية ومركباتها

مقدمة من طرف:

بوعروج سوسن زروالي خديجة

بومعالي عبد المالك	أستاذ تعليم عالي	جامعة العربي التبسي-تبسة-	رئيس اللجنة
شمام فيصل	أستاذ تعليم عالي	جامعة العربي التبسي-تبسة-	مؤطر
شاوش ياسين	أستاذ محاضر(ب)	جامعة العربي التبسي-تبسة-	الممتحن

تاريخ المناقشة:

2019/06/26

كلمة شكر

لابد لنا ونحن نخطو خطواتنا الأخيرة في الحياة الجامعية من وقفة نعود إلى أعوام قضيناها في رحاب الجامعة مع أساتذتنا الكرام الذين قدموا لنا الكثير باذلين بذلك جهودا كبيرة في بناء جيل الغد لتبعث الأمة من جديد...

وقبل أن نمضي نقدم أسمى آيات الشكر والامتنان والتقدير والمحبة إلى الذين حملوا أقدس رسالة في الحياة...

إلى الذين مهدوا لنا طريق العلم والمعرفة...

إلى جميع أساتذتنا الأفاضل...

ونخص بالذكر:

الدكتور: شمام فيصل أستاذ تعليم عالي بجامعة العربي التبسي –تبسة- على ما قدمه لنا من علم نافع وعطاء متميز وإرشاد مستمر.

كما أننا نتوجه له بخالص الشكر والامتنان والعرفان بالجميل، لأنه رغم انشغالاته والتزاماته العديدة إلا أنه لم يبخل علينا بتوجيهاته ونصائحه ولا حتى بتشجيعاته لنا للمُضيّ إلى الأمام، شكرا على وقوفك إلى جانبنا وعلى تصويبك لنا عندما ضللنا الطريق.....

كما نتقدم بخالص الشكر إلى أعضاء اللجنة: أستاذ التعليم العالي بومعالي عبد المالك والأستاذ المحاضر شاوش ياسين لقبولهم تقييم عملنا المتواضع.

وكذلك نشكر كل من ساعد على إتمام هذه المذكرة وقدم لنا العون ومد لنا يد المساعدة وزودنا ولو حتى بمعلومة لإتمام هذا البحث.

بِسۡمِ ٱللَّهِ ٱلرَّحۡمَٰنِ ٱلرَّحِيمِ والصلاة والسلام على أشرف المرسلين، سيد الخلق أجمعين.

قال الله تعالى: "يَرْفَعِ اللَّهُ الَّذِينَ آمَنُوا مِنكُمْ وَالَّذِينَ أُوتُوا الْعِلْمَ دَرَجَاتٍ وَاللَّهُ بِمَا تَعْمَلُونَ خَبِيرٌ".

وقال أيضا: "وَقُل رَّبِّ زِدْنِي عِلْمًا".

أستهلّ قولي بالحمد لله. الحمد لله الذي بفضله تتم الصالحات، الحمد لله الذي وفقني لأن أكون هنا. الحمد لله. راجية منه أن أكون في منصب وعلى منصة أسمى من التي أقف عليها الآن (يا رب قدّر لي الخير حيث كان وأرضني به).

داعيّةً المولى أن يكلِّل هذا العمل بالنجاح والقبول من جانب أعضاء لجنة المناقشة المبجلين.

إهـــــــــداء

أهدي ثمرة عملي هذا إليّ. إلى "سوسن" التي أفنت كل مجهوداتها للوصول إلى هنا رغم أنها تكاسلت في معظم الأحيان (غرور).

إلى الذي لم يبخل عليا يوما، لا من عطائه ولا من نصائحه وتوجيهاته، إلى من أحمل اسمه بكل افتخار، إلى من سهر الليالي من أجل تحقيق أحلامي، إلى من نهلت منه كل مبادئي التي أحيا بها، إلى أبي الغالي "بوعروج لزهر". أبي يا وقاك الله شر النوائب. شكرا لأنك أنت أبي.

"لن أوفيك حقك مهما تكلمت". إلى التي حملتني في بطنها، إلى التي تنسى نفسها ولا تنسانا أنا وإخوتي، إلى ملجئي الآمن الذي لا اتوانى لحظة للجوء إليه، إلى ملاكي في الحياة ومليكة قلبي، إليك غاليتي "لعبيدي مليكة" أدامك الله ذخرا لنا.

إلى الأستاذ "شمام فيصل" الذي لولا مجهوداته المبذولة لما أكملت عملي. شكرا لأنك لم تبخل عليّا لا بمعلوماتك ولا بوقتك.

إلى أستاذي "فارح م. الطيب" الذي علمني التفاؤل والمضي إلى الأمام.

إلى سندي، إلى أخي وصديقي، إلى من يقف بجانبي وحتى أمامي لمواجهة صعاب الحياة. إليك "محمد لمين". رزقك الله كل ما تتمنى.

إلى معنى الشقاوة والجنون والضحك، إلى منافسي الأول "خالد". اعلم أني أسبقك دائما بخطوة. فحافظ على أنفاسك حتى ينجلي لنا خط النهاية فمنافستك قوية (ثقة). أتمنى لك فعلا كل الخير في حياتك (حتى وإن سبقتني فأنت المرآة التي أرى نفسي فيها وبها).

إلى أختي الحبيبة "عقيلة"، حقق الله أحلامك ووفقك لنيل مبتغاك.

إلى صغيرنا ومدلّلي، إلى المشاكس والكسول "يوسف". وفقك الله في مسيرتك.

إلى من تذوقت معهم أجمل اللحظات، إلى من سأفتقدهم وأتمنى أن يفتقدوني: أنيستي "زروالي خديجة"، المشاغبة "ساري دنيا" و"حنين بوزيدة".

إلى جميع زملائي من طلبة قسم علوم المادة.

كما أهدي هذا العمل إلى كافة الأهل الذين لم تسعهم ورقتي لذكر أسماءهم.

إهداء

إلى من أحمل اسمه بكل فخر إلى من وهبني كل ما يملك لأحقق ما أتمنى إلى من كان يدفعني لتحقيق المبتغى إلى من سهر الليالي من اجل تحقيق أحلامي إلى من زرع فيا مكارم الأخلاق و أنبل القيم، الى قدوتي، الى أعظم أب إلى أبي الغالي "زروالي الطيب" أدامه الله وأطال في عمره.

إلى جسر الحب الصاعد بي للجنة الى نور حياتي، الى التي كانت دعواها لي بالتوفيق، تتبعتني خطوة خطوة في عملي، إلى من ارتحت كلما تذكرت ابتسامتها في وجهي نبع الحنان أملي في الحياة، قرة عيني وسر نجاحي أمي الغالية "صافي زهية" أدامها الله تاجا على رأسي.

شكرا لكما والديا ومهما قلت لن اكفي حقكما ومهما فعلت سوف أبقى مدينة لكما طوال حياتي.

إلى روح جدي الغالي ستظل الملجأ الآمن الذي فقدناه والنور الذي انطفأ برحيلك

إلى من أرى التفاؤل بعينه..و السعادة في ضحكته إلى أخي الوحيد "خليل".

إلى القلوب الطاهرة الرقيقة و النفوس البريئة إلى رياحين حياتي: نسرين، إبتسام، مريم إلى معنى الشقاوة و البراءة أختي الصغيرة "كنزة".

إلى الأستاذ شمام فيصل الذي حرص على توجيهنا ومساعدتنا لإتمام هذه المذكرة.

إلى من اظهروا لي أجمل ما في الحياة إلى من كانوا ملاذي و ملجئي إلى من تذوقت معهم أجمل اللحظات....سوسن، حنين، دنيا حفظكم الله لي يا معنى الصداقة.

إلى عائلتي الكبيرة ادامكم الله لي

إلى الذين مهدوا لي طريق العلم والمعرفة...
إلى جميع أساتذتي الأفاضل...
"كن عالما.. فإن لم تستطع فكن متعلما، فإن لم تستطع فأحب العلماء، فإن لم تستطع فلا تبغضهم".

الملخص

قمنا بإجراء محاكاة ذرية تعتمد على طريقة Monte-Carlo للمعادن الانتقالية التالية: الحديد (Fe)، الكوبالت (Co)، النيكل (Ni) والغادولونيوم (Gd). وذلك من أجل معرفة وتحديد بعض الخواص المغناطيسية. حيث أخذنا هذه النتائج المتحصل عليها ثم رسمنا عدة منحنيات التي تمكنّا من خلالها من معرفة هذه الخواص والتي منها: درجة حرارة Curie، وبواسطة هذه المنحنيات حددنا T_c لكل معدن، وتمت مقارنة هذه النتائج المقاسة بالنتائج التجريبية.

باستخدام برنامج POVRay تمكنّا من رؤية تصرف العزوم على المستوى المجهري في مختلف درجات الحرارة. وكذلك قمنا برسم منحنيات تباين المناحي ودورات الهسترة للمعادن المدروسة، وقمنا أيضا بالتغيير في سمك العينات المستخدمة لمعرفة تأثيره على الخواص المغناطيسية بحيث لاحظنا أن درجة حرارة Curie تختلف باختلاف السمك، كما أن قيم حقل التشبع H_S والحقل القسري H_c الخاصة بكل دورة تكون مختلفة. وهذا راجع إلى أن للحجم المحدود تأثير على هذه الخصائص.

لقد حضرنا مركب الـ GdFe لتحديد كل من درجة حرارة Curie ودرجة حرارة التعويض، وذلك بالتغيير في نسبة الغادولونيوم من 5% الى 100%. فوجدنا أن درجة حرارة التعويض تظهر في المجال [25%-30%] وكانت متناقصة خلاله وهذا يدل على أن الشبكة التحتية للغادولونيوم أكبر من الشبكة التحتية للحديد أي أن اتجاه العزوم المغناطيسية الخاصة بالغادولونيوم هو الاتجاه المسيطر في المركب بعد نسبة 30%.

وبتحليلنا لمجمل النتائج توصلنا إلى أن المحاكاة باستخدام طرق Monte-Carlo هي طريقة مثلى لنمذجة الظواهر الفيزيائية ولمعرفة تفاصيل حول العناصر الأساسية التي تتحكم في الخصائص العيانية للمواد المغناطيسية لأن هذه النتائج المقاسة متوافقة مع النتائج التجريبية.

الكلمات المفتاحية:

محاكاة، Monte-Carlo، Fe، Gd، Ni،Co، العزوم المغناطيسية، درجة حرارة Curie، تباين المناحي المغناطيسي، دورة الهسترة، مركب GdFe، درجة حرارة التعويض، حقل التشبع، الحقل القسري، مغنطة التشبع والمغنطة المتبقية.

Résumé

Nous avons effectué une simulation atomique basée sur la méthode de Monte-Carlo des métaux de transition suivants : Fer (Fe), Cobalt (Co), Nickel (Ni) et Gadolinium (Gd). Afin d'identifier et de déterminer certaines propriétés magnétiques. Nous avons pris ces résultats obtenus puis avons tracé plusieurs courbes dans lesquelles nous avons pu connaître ces propriétés, notamment : la température de Curie où nous avons identifié Tc pour chaque métal et comparé ces résultats avec les résultats expérimentaux.

En utilisant POVRay, nous avons pu voir le comportement des moments magnétiques à l'échelle microscopique pour des différentes températures. Nous avons aussi étudié l'anisotropie magnétique et les cycles d'hystérésis. Nous avons également observé une variation de l'épaisseur utilisés pour déterminer leur effet sur les propriétés magnétiques, où nous avons pu constater la température de Curie varié en fonction des épaisseurs et que le champ de saturation Hs et le champ coercitive Hc oscillent en fonction de l'épaisseur des échantillons. Cela est dû à l'effet de la structures nanométriques sur les propriétés magnétiques.

Nous avons préparé l'échantillon du GdFe pour déterminer à la fois la température de Curie et la température de compensation en modifiant le rapport Gadolinium dans le Fer de 5% à 100%. Nous avons constaté que la température de compensation (T_{comp}) apparait dans la gamme du rapport de [25%-30%]. Cette température (T_{comp}) était en baisse, ce qui indique que le sous-réseau du Gadolinium est supérieur au sous-réseau du Fer, c'est-à-dire que la direction des moments magnétiques du Gadolinium a une tendance dominante du composé après 30%.

En analysant les résultats, nous avons constaté que la simulation utilisant les méthodes de Monte-Carlo était un moyen idéal de modéliser des phénomènes physiques et de se familiariser avec les propriétés magnétiques des matériaux magnétiques, car ces résultats mesurés concordent avec les résultats expérimentaux.

Mots Clé :

Simulation, Monté-Carlo, Fe, Gd, Ni, Co, Moments magnétiques, température de Curie, Anisotropie magnétique, Cycles d'hystérésis, GdFe, Température de compensation, Champ de saturation, Champ coercitive, aimantation de saturation, aimantation rémanente.

Abstract

We carried out an atomic simulation based on the Monte-Carlo method of the following transition metals: Iron (Fe), Cobalt (Co), Nickel (Ni) and Gadolinium (Gd). To identify and determine certain magnetic properties. We took these obtained results and then plotted several curves in which we could know these properties, in particular: The Curie temperature where we identified Tc for each metal and compared these results with the experimental results.

Using POVRay, we could see the behavior of magnetic moments at the microscopic scale for different temperatures. We also studied magnetic anisotropy and hysteresis loops. We also observed a variation of the thickness used to determine their effect on the magnetic properties, where we have been able to observe the Curie temperature varied according to the thicknesses and that the saturation field Hs and the coercive field Hc oscillate as a function of the thickness of the Gadolinium sample. This is due to the nanometric structures effect on magnetic properties.

The GdFe sample was prepared to determine both the Curie temperature and the compensation temperature by changing the Gadolinium ratio in iron from 5% to 100%. We found that the compensation temperature (Tcomp) appears in the range of [25% -30%]. This temperature (Tcomp) was decreasing, indicating that the Gadolinium sublattices is greater than the iron sublattices, that is, the magnetic moment direction of Gadolinium has a dominant tendency of the compound after 30%.

Analyzing the results, we found that Monte Carlo simulation is an ideal way to model physical phenomena and become familiar with the magnetic properties of magnetic materials, as these measured results are consistent with the experimental results.

KeyWords:

Simulation, Monté-Carlo, Fe, Gd, Ni, Co, Magnetic moments, Curie temperature, Magnetic Anisotropy, hysteresis loops, GdFe, Compensation Temperature, Saturation Field, Coercive Field, Magnetization of Saturation, Remanent magnetization.

الفهرس:

الفصل الثالث: تحليل النتائج.

الخاتمة العامة.

قائمة الرموز:

Leur sens en français	معناه بالعربية	الرمز
Fer	الرمز الكيميائي للحديد	Fe
Nickel	الرمز الكيميائي للنيكيل	Ni
Cobalt	الرمز الكيميائي للكوبالت	Co
Gadolonium	الرمز الكيميائي للغادولونيوم	Gd
Le composé GdFe	المركب حديد- غادولونيوم	GdFe
Le composé FePt	المركب حديد-بلاتونيوم	FePt
3 Dimensions	ثلاثي الأبعاد	3D
Le moment magnétique du volume	العزم المغناطيسي لوحدة الحجم	I
L'ion du Titanium	شاردة التيتانيوم	Ti^{3+}
L'aimantation	المغنطة	M
L'ion du Cuivre	شاردة النحاس	Cu^{2+}
L'aimantation du moment i	مغنطة العزم i	M_i
Le nombre des moments	عدد العزوم	N
La sensibilité	الحساسية المغناطيسية	χ
La température magnétique	درجة الحرارة	T
Les couches électronique	الطبقات الالكترونية	f،d،p،s
La température du Néel	درجة حرارة Néel	T_N
La température du Curie	درجة حرارة Curie	T_c
La température du Compensation	درجة حرارة التعويض	T_{comp}
L'aimantation spontanée	المغنطة التلقائية	M_s
L'aimantation à 0K	المغنطة عند 0K	M_0
L'aimantation rémanente	المغنطة المتبقية	M_r
Haméltonien	الهاملتوني	$\mathcal{H}$
Le constant d'interaction d'échange	ثابت التأثير المتبادل	J_{ij}
la matrice du tenseur	مصفوفة التنسور	$\overrightarrow{J_{ij}^{M}}$
Les matériaux ferromagnétique	المواد الفيرومغناطيسية	F
Les matériaux anti ferromagnétique	المواد ضد الفيرومغناطيسية	AF
Le champs coercitive	الحقل القسري	H_C
Le champs du saturation	حقل التشبع	H_s
Le champs d'interaction d'échange	حقل تبادل التفاعل	$\mathcal{H}_{exc}$
Le champs d'anisotropie magnétique	حقل تباين المناحي المغناطيسي	$\mathcal{H}_{ani}$
Le champs magnétique appliqué	الحقل المغناطيسي المطبق	$\mathcal{H}_{app}$
L'énergie d'échange d'interaction des moments	طاقة التبادل لنظام تفاعل العزوم الذرية	H_{ext}
Le vecteur d'unité qui indique la direction locale du moment	شعاع الوحدة الذي يبين الاتجاه المحلي للعزم	$\overrightarrow{S_i}$
La direction du moment instantané	اتجاه العزم اللحظي للذرات المجاورة	$\overrightarrow{S_j}$
Le moment instantané atomique	العزم الذري اللحظي	μ_s
L'énergie d'échange	طاقة التبادل	$\mathcal{H}_{exc}^{M}$
L'énergie d'anisotropie d'un mono ion	طاقة تباين المناحي لأيون منفرد أحادي المحور	$\mathcal{H}_{ani}^{uni}$
L'anisotropie cubique	تباين المناحي المكعبي	$\mathcal{H}_{ani}^{cub}$
Le champs d'anisotropie	حقل تباين المناحي	H_a
L'énergie d'anisotropie unixial de chaque atome	طاقة التباين الأحادي لكل ذرة	k_u
L'énergie d'anisotropie cubique de chaque atome	طاقة تباين المناحي المكعبي لكل ذرة	k_c
L'énergie d'anisotropie d'un cristal cubique	طاقة تباين المناحي لبلورة مكعبة	E^{cub}
Les constantes d'anisotropie	ثوابت تباين المناحي	K_2 ،K_1
Les transactions de routage	معاملات التوجيه	α_3 و α_2،α_1
Le magnéton u Bohr	مغناطيس Bohr	μ_B
L'énergie d'anisotropie d'un cristal hexagonal	طاقة تباين المناحي لبلورة سداسية	E^{hex}
Le cellule unitaire	خلية الوحدة	a
Le temps	الزمن	t
Le ratio gyromagnétique	النسبة الجيرو مغناطيسية	γ

Le perméabilité au vide	نفاذية الفراغ	μ_0
Le constant de Boltzmann	ثابت بولتزمان	k_B
Les nombre d'atome dans Le cellule unitaire	عدد الذرات في وحدة الخلية	n_{at}
Cubique simple	بنية مكعبة بسيطة	cc
Cubique à faces centrés	بنية مكعبة ممركزة الأوجه	fcc
Hexagonal	بنية سداسية	hcp
Cubique centrée	بنية مكعبة ممركزة الجسم	bcc
Kelvin	الكلفن	K
L'unité de distance (Mètre)	وحدة قياس الأبعاد (المتر)	m
Le nombre des atomes les plus proches	عدد الجوار الأقرب	z
Le coefficient de corrélation du réseau cristallin	معامل التصحيح المرتبط بالشبكة البلورية	ϵ
Le constant d'anisotropie visuel	ثابت تباين المناحي العياني	K_u
Le coefficient de rétention microscopie	معامل التخامد المجهري	λ
La distance d'interface	المسافة البينية	r_{ij}
Le vecteur d'unité qui décrit de L'aimantation d'échantillon	شعاع الوحدة يصف اتجاه مغنطة العينة	$\vec{m}$
Le constant de rétention	ثابت التخامد	α
L'équation de Landau-Lifshitz	معادلة Landau-Lifshitz	معادلة LL
L'équation de Landau-Lifshitz- Gilbert	معادلة Landau-Lifshitz-Gilbert	معادلة LLG
Le champs magnétique effective de chaque moment	الحقل المغناطيسي الفعال لكل عزم	$\vec{H}_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{i}}$
La variation d'énergie	التغير في الطاقة	ΔE
Le probabilité	الاحتمال	P
Le nombre des partition de Gaussian	عدد التوزيعات لـ *Gaussian*	$\vec{\Gamma}$
La largeur du cône	عرض المخروط حول العزم الإبتدائي $\vec{S}_i$	σ_g
Le champs coercitive du champs d'anisotropie	الحقل القسري لحقل تباين المناحي	H_k
L'aimantation relative	المغنطة النسبية	M/Ms
L'unité de distance (Nanomètre)	وحدة قياس الأبعاد (النانومتر)	nm
L'unité de mesure l'intensité du champs magnétique	وحدة قياس شدة الحقل المغناطيسي	Tesla
L'épaisseur d'échantillon	سمك العينة	t_c
L'angle entre l'aimantation et la direction facile	الزاوية بين المغنطة و الاتجاه السهل	θ
L'axe facile d'aimantation	اتجاه المغنطة السهل	c
L'angle sphérique	الزاوية الكروية	φ
L'unité de distance (Angshtrom)	وحدة قياس الأبعاد (الأنقيشتروم)	Å
L'unité d'énergie	وحدة قياس الطاقة	J

+قائمة الأشكال:

قائمة الجداول:

المقدمة العامة

لقد أبرزت التكنولوجيا الحديثة لتقنيات التطوير وخصائصها على مدى السنوات الأخيرة العديد من المجالات في فيزياء المادة المكثفة وفيزياء المواد. وهكذا ظهرت فئات جديدة من المواد ذات الطبيعة المغناطسية المختلفة عن الطبيعة الكتلية [1]. مما فتح مجالات وآفاقا واسعة للبحث أمام كل من الفيزيائيين والتقنيين.

في كثير من الحالات تكون التجربة غير قابلة للتحقيق أو مكلفة للغاية. ومن أجل هذا اتجه الباحثون نحو المحاكاة العددية. هذه الأخيرة تحدد طريقة يتم بموجبها تنفيذ برنامج حاسوبي على الكمبيوتر من أجل محاكاة ظاهرة واقعية معقدة. وهي تُستخدم الآن في العديد من المجالات العلمية والصناعية من الميكانيك الإحصائية إلى العلوم الاجتماعية.

إن أغلب التحاكي المغناطيسي حاليا يستخدم الميكرومغناطيسية (micromagnétisme) من أجل استنتاج وفهم التصرف المغناطيسي للمركبات على السلم النانومتري، حيث أنه يقدم تفاصيل حول العناصر الأساسية والعمليات الفيزيائية التي تتحكم في الخصائص العيانية. ولكن بسبب الوتيرة السريعة لتكنولوجيا تطوير المواد المغناطيسية والتقريب النانومتري حال دون تطبيق التقريب الميكرومغناطيسي على الكثير من المشاكل المهمة في بداية القرن الحادي والعشرين، ومن أمثلة هذه الأخيرة نذكر: التسجيل المغناطيسي المرتبط بالحرارة [2]، الناقلية عن طريق العزم المغزلي (Spin)، exchange bias [3]، تباين مناحي السطح وتباين مناحي السطح البيني [5،4] والمواد عالية تباين المناحي ذات كثافة وسائط التسجيل العالية جدا مثل FePt [6].

يرمي التحاكي الذري جسرا بين التقريب الميكرومغناطيسي والبنية الإلكترونية وذلك بدراسة مركب مغناطيسي على السلم الذري الطبيعي. ومن بين تقنيات المحاكاة نجد طريقة Monte Carlo، التي يتم تعريفها من خلال العمليات التي تهدف لحساب قيمة عددية باستخدام كميات عشوائية. يشير إسم هذه الأساليب إلى ألعاب الحظ (Jeux de Hasard) التي تمارس في مدينة Monte Carlo بكثرة. ولقد سمحت لنا هذه التقنية بالتحقق من النتائج التجريبية للنموذج الرياضي المقترح.

إن الهدف من هذه المذكرة هو دراسة هذه الطرق، والإشارة إلى الدقة التي توفرها، ودراسة الخواص المغناطسية للمعادن الانتقالية التالية: Fe، Co، Ni، Gd، ومركب الـ GdFe، تحديد درجات حرارة Curie، رسم بيان الهسترة ومنحنى تغيرات تباين المناحي. ولتحقيق هذه الأهداف، سيتم صياغة عملنا في ثلاثة فصول على النحو التالي:

- الفصل الأول سوف نعرض فيه المواد المغناطيسية، وسوف نقدم تذكير حولها وحول بعض الظواهر (التأثير المتبادل، التباين المغناطيسي (Anisotropies magnétique)...).

- سيتم تخصيص الفصل الثاني لعرض بعض الطرق الرياضية التي يمكننا بموجبها دراسة الخصائص المغناطيسية للنظام. وسيتم أيضا تقديم دراسة مفصلة حول طرق Monte Carlo، من حيث التعريف، المبدأ والتطبيقات...

- أما بالنسبة للفصل الثالث فسوف نقدم نتائجنا التطبيقية لطريقة Monte Carlo الخاصة بـ: Fe، Co، Gd، Ni وأخيرا مركب GdFe وذلك من خلال استخدام نموذج Heisenberg للعزوم.

ثم نختتم بخلاصة، مع إبراز أهمية وآفاق بحثنا، وبعض وجهات النظر لتحسين النتائج ولمواصلة هذا العمل.

المراجع:

[1]. *T. Elbahraoui, « Etude des propriétés structurales magnétiques et de transport des couches minces et multicouches Co_xZn_{1-x}; $(Co_xZn_{1-x}/Cu; Co)_n$, préparées par électrodéposition ». Thèse de l'université MOHAMMED V(Maroc) (2007).*

[2]. *M. H. Kryder, E. C. Gage, T. W. McDaniel, W. A. Challener, R. E. Rottmayer, G. Ju, Y.-T. Hsia, and M. F. Erden, Proceedings of the IEEE* ***96****(2008)1810.*

[3]. *K. O'Grady, L. E. Fernandez-Outon, and G. Vallejo- Fernandez, J. Magn. Mater.* ***322****(2010)883.*

[4]. *S. Ikeda, K. Miura, H. Yamamoto, K. Mizunuma, H. D. Gan, M. Endo, S. Kanai, J. Hayakawa, F. Matsukura, and H. Ohno, Nature Materials* ***9****(2010)721.*

[5]. *M. Jamet, W. Wernsdorfer, C. Thirion, D. Mailly, V. Dupuis, P. Melinon, and A. Perez, Phys. Rev. Lett.* ***86****(2001) 4676.*

[6]. *T. Klemmer, N. Shukla, C. Liu, X. Wu, E. Svedberg, O. Mryasov, R. Chantrell, D. Weller, M. Tanase, and D. Laughlin, Appl. Phys. Lett.* ***81****(2002) 2220.*

الفصل الاول

مقدمة:

إن الأنظمة ذات الحجم الصغير أو الحجم النانوي (متناهية الصغر) تُظهر سلوكًا مغناطيسيًا مختلفًا عنه في المواد العيانية بسبب عدة عوامل كثيرة، منها ما هو مرتبط بالتأثيرات السطحية: ضعف تفاعلات التبادل بسبب قلة عدد الجسيمات المغناطيسية (قلة في عدد ذرات الجوار)، التأثيرات المغناطيسية المرونية بسبب إجهادات القص، التأثير الحراري المغناطيسي، التباين المغناطيسي...؛ في هذا الفصل سوف نصف الخصائص المغناطيسية للأنظمة ذات الأبعاد الصغيرة مع التذكير ببعض المفاهيم الأساسية المستخدمة في بقية المذكرة.

I. المواد المغناطيسية:

يعود مفهوم المغناطيسية إلى عصور ما قبل التاريخ، حيث تُعرَّف المغناطيسية على شكل مغناطيس، الذي يتكون من خام المغنتيت (Magnétite). يعتبر اسم الخام أصل كل علم في المغناطيسية، وهذه التسمية راجعة إلى مقاطعة Magnésie اليونانية في Thessalie، حيث تم هناك العثور على أكسيد الحديد الأسود كمعدن طبيعي. ومن المرجح جداً أن المراقبين الأوائل كانوا مفتونين بقوة الجذب والتنافر بين حجر المغنتيت.

تنتج المغناطيسية في الأصل من حركة الإلكترونات بحيث يولّد الإلكترون مجال مغناطيسي بطريقتين:

- حركة الإلكترونات حول نواة الذرة.
- حركة الإلكترونات حول نفسها وتسمى هذه الحركة بالحركة المغزلية.

يكون تأثير الطريقة الأولى ضئيل في الخصائص المغناطيسية، لذلك فإن معظم هذه الأخيرة ترجع إلى الطريقة الثانية [1].

في الحالة الحرة، نقول أن الذرة مغناطيسية إذا كانت تحمل عزم مغناطيسي دائم ممثل بمتجه ذو طويلة ثابتة (عزم مغناطيسي لكل وحدة من الحجم) ويسمى أيضًا الاستقطاب المغناطيسي أو شدة المغنطة، يرمز له عموما بـ M. إذا كانت هناك عزوم مغناطيسية M_1، M_2، ...،M_n فإن العزم المغناطيسي لوحدة الحجوم يعطى بواسطة المعادلة التالية:

$$I = \sum_{i=1}^{n} M_i \qquad (1-1)$$

إذا كانت هذه العزوم لها نفس المقدار M، وكانت متوازية مع بعضها البعض، يتم تبسيط المعادلة (1-1) إلى:

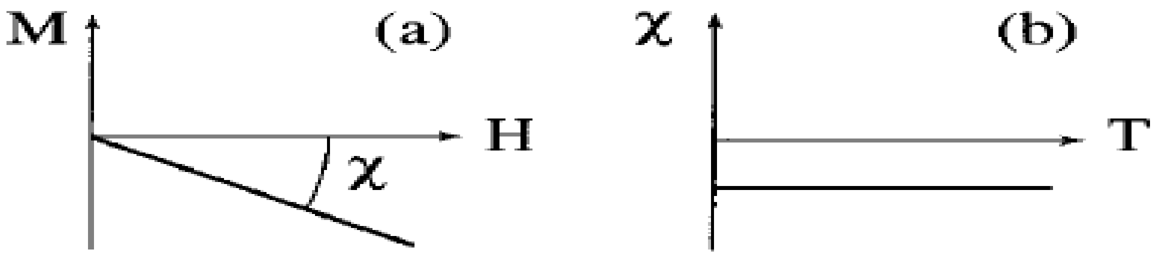
$$I = N.M \qquad (2-1)$$

حيث: N هو إجمالي عدد العزوم M في وحدة الحجوم [3،2].

قد يعتمد معامل العزوم المغناطيسية (اتجاهها) للذرات المغناطيسية على البيئة الخاصة بكل ذرة: من طبيعة وموضع الذرات المجاورة، درجة الحرارة، والحقل المغناطيسي المطبق...؛ سنقدم الآن الأنواع الرئيسية من السلوكيات المغناطيسية؛ هذه الأنواع الرئيسية هي:

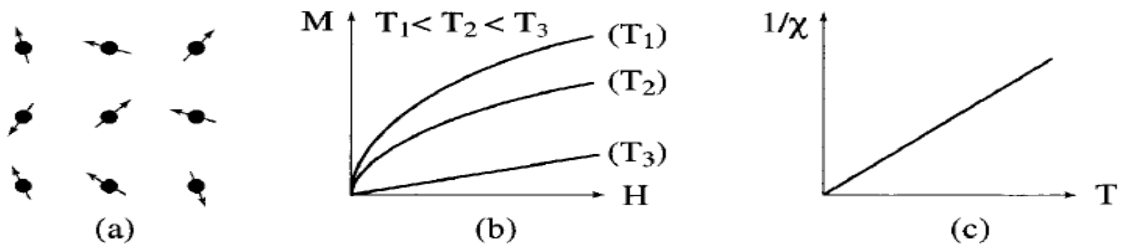
- **المغناطيسية المعاكسة (D*iamagnétisme*):** هي خاصية تُميز المواد التي تحتوي على ذرات غير مغناطيسية فقط، أي أن طبقة التكافؤ ممتلئة تمامًا (أو فارغة تمامًا)، مغنطتها التي يسببها الحقل المطبق ضعيفة جدا ومعاكسة لهذا الأخير (عند تطبيق حقل مغناطيسي على المواد التي تحمل هذه الخاصية، تتحرك الإلكترونات

بحركة دائرية وهذه الحركة ماهي إلا تيارات كهربائية مغلقة، وإحداث أي تغير في التدفق المغناطيسي عليها يؤدي إلى إنتاج تيار حثي عزمه المغناطيسي معاكس لاتجاه تغير التدفق). إن الحساسية المغناطيسة لهذه المركبات سالبة، وهي مستقلّة تماما عن الحقل المطبق وعن درجة الحرارة. توجد هذه الخاصية المغناطيسية أيضًا في المواد ذات الذرات المغناطيسية، ولكنها ضعيفة جدًا بحيث يتم حجبها تمامًا من خلال مساهمة الذرات المغناطيسية (انظر الشكل (1-1)) [4]. ومن المواد التي تمتاز بهذه الخاصية نجد: السيليكون، الفضة، الزئبق، الرصاص...؛ وتكون هذه الخاصية قوية في المواد فائقة الناقلية أين تكون حساسيتها سالبة.



<u>الشكل (1-1):</u> (a) يمثل تغيرات المغنطة بدلالة تغير الحقل المغناطيسي المطبق، (b) يمثل التغير الحراري للحساسية المغناطيسية للمواد ذات الطبيعة المغناطيسية المعاكسة(Diamagnétisme) [4].

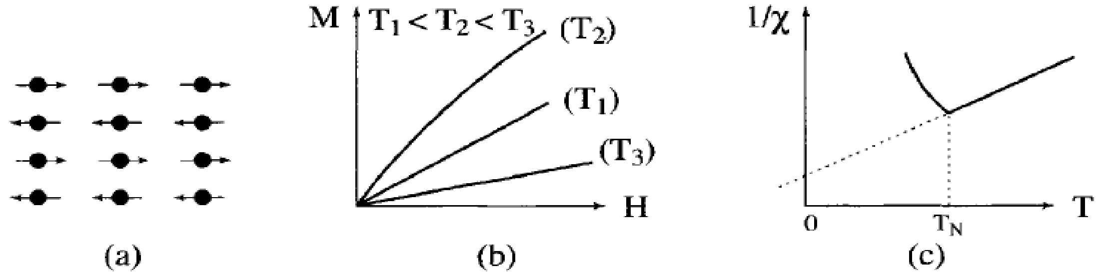
- **المغناطيسية المسايرة (*Paramagnétisme*):** تأتي مغناطيسية المواد التي تملك هذه الخاصية من عزوم مغناطيسية دائمة تحملها بعض من ذراتها أو جميعها. هذه العزوم لا تتفاعل عمليا فيما بينها ويمكنها التحرك بحرية في أي اتجاه (عشوائية)، محصلتها تساوي الصفر. وعند تطبيق الحقل المغناطيسي يتم تعديل القيمة المتوسطة لاتجاه العزوم (اتجاه العزوم يتغير) وتظهر المغنطة المتغيرة بدلالة الحقل المغناطيسي المطبق. هذه المغنطة تكون ضعيفة عند درجات الحرارة المرتفعة، والحساسية تكون ذات مقدار موجب وأقل من الوحدة وهي لانهائية عند الصفر المطلق وتقل عند زيادة درجة الحرارة (انظر الشكل (1-2)) [4]. ومن المواد التي تمتاز بهذه الخاصية نجد: الألمنيوم والزجاج.



<u>الشكل(1-2):</u> يمثل خصائص المغناطيسية المسايرة (Paramagnétisme)؛ (a) يمثل شبكة من العزوم البارامغناطيسية، (b) يمثل تغيرات المغنطة تحت تأثير الحقل المغناطيسي ويوضح تأثير درجة الحرارة، (c) يمثل التغير الحراري لمقلوب الحساسية المغناطيسية [4].

- **المغناطيسية الحديدية المضادة (*Antiferromagnétisme*):** مغناطيسية المواد التي تملك هذه الخاصية ضعيفة وتشبه المغناطيسية المسايرة (Paramagnétisme) بمعنى أن الحساسية ضعيفة وموجبة. ومع ذلك فإن التغير الحراري لمقلوب الحساسية المقاس من مادة ما له قيمة دنيا عند درجة الحرارة المسماة بدرجة

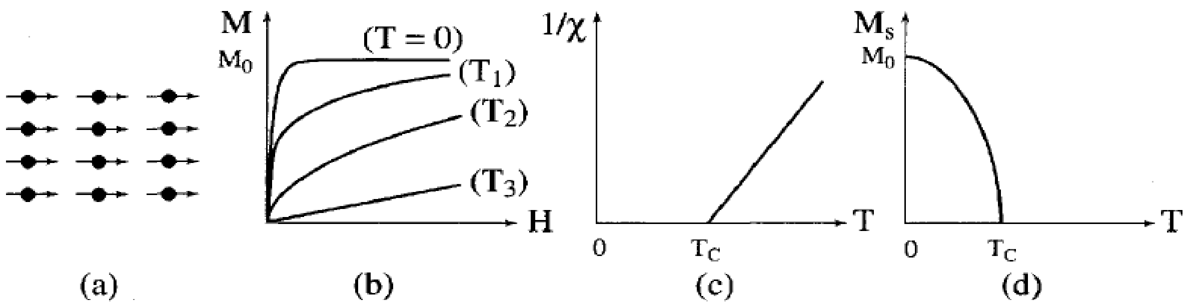
حرارة Néel (T_N)، وتأخذ الحساسية عندها قيمة عظمى. عند درجات حرارة دون T_N يكون ترتيب العزوم المغناطيسية متوازي ومتعاكس في الاتجاه في المادة المقسمة في حالتها الطبيعية إلى شبكتين فرعيتين متداخلتين مغنطتهما متساوية (العزوم متبادلة بينهما)، بحيث أنه في غياب الحقل تكون المغنطة الكلية معدومة [4]. (الشكل (3-1)).



***الشكل (1-3):** المغناطيسية الحديدية المضادة (Antiferromagnétisme)؛ (a) يمثل شبكة من العزوم ضد الفيرومغناطيسية، (b) يمثل تغيرات المغنطة تحت تأثير الحقل المغناطيسي، (c) يمثل التغير الحراري لمقلوب الحساسية المغناطيسية [4].*

- **المغناطيسية الحديدية (*Ferromagnétisme*):** المواد التي تملك هذه الخاصية هي مواد يمكن أن تمتلك مغنطة حتى في غياب الحقل المغناطيسي الخارجي. في الواقع في هذه المواد الصلبة العزوم المغناطيسية تبقى لها قيمة حتى عند درجات الحرارة التي تكون فيها طاقة تفاعل ثنائي القطب بين العزوم غير كافية لضمان تماسكها. وبسبب التفاعلات المغناطيسية تصبح الحساسية - بدلاً من أن تصبح لا نهائية عند الصفر المطلق كما هو الحال في البارامغناطيسية- لانهائية عند درجة حرارة مميزة تدعى درجة حرارة Curie (T_c). دون درجة الحرارة هذه تظهر المغناطيسة التلقائية (M_s) في حالة عدم وجود حقل مطبق، وتحقق المغنطة عند درجة حرارة صفر قيمتها القصوى M_0 الموافقة لتوازي كل العزوم الفردية.

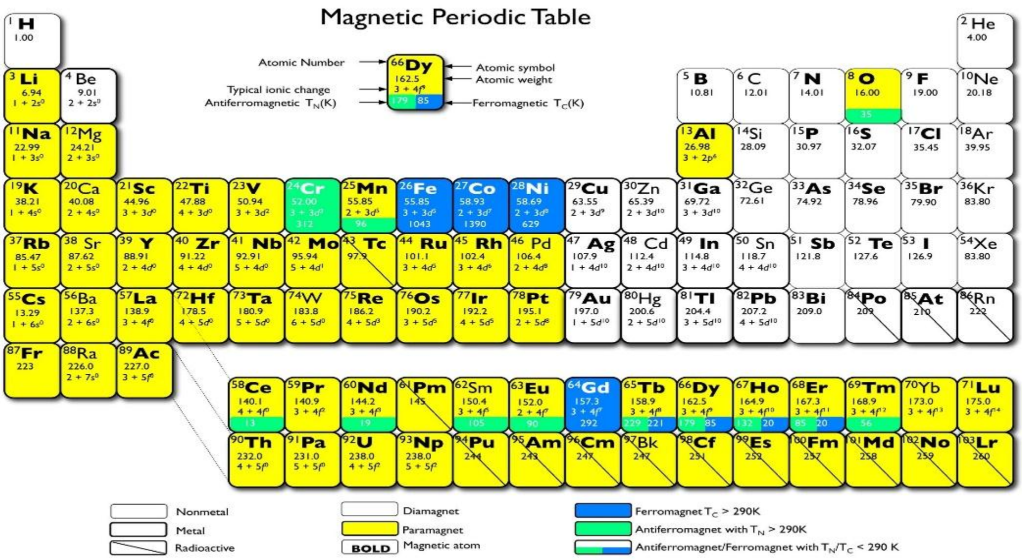
وسميت هذه الخاصية بالحديدية نسبة إلى الحديد الذي يعتبر من أشهر المواد المغناطيسية التي تمتلك هذه الخاصية. ومن الأمثلة على هذه الأخيرة: الحديد، الكوبالت، النيكل [5].



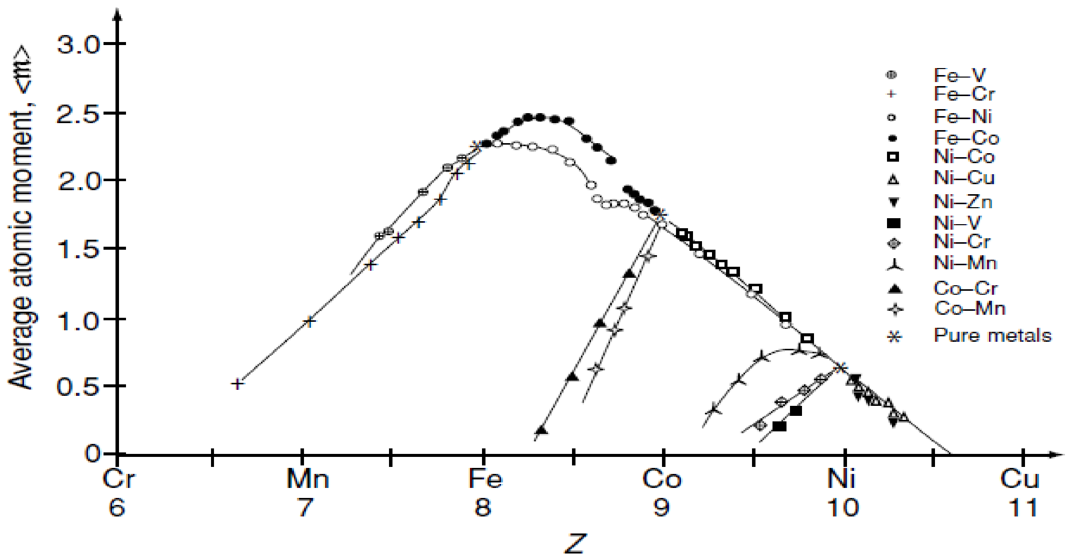
***الشكل (1-4):** المغناطيسية الحديدية (Ferromagnétisme)؛ (a) يمثل شبكة من العزوم المتساوية التي لها نفس الاتجاه، (b) يمثل تغيرات المغنطة تحت تأثير تطبيق حقل مغناطيسي، (c) يمثل تغيرات مقلوب الحساسية بدلالة درجة الحرارة، (d) يمثل تغيرات المغنطة التلقائية بدلالة درجة الحرارة [4].*

معظم المواد الفيرومغناطيسية عبارة عن معادن انتقالية، وهي مواد تتميز بالتعبئة التدريجية للطبقة 3d (من أيون Ti^{3+} ($3d^1$) إلى غاية Cu^{2+} ($3d^9$)). (أنظر الشكل (1-5)).

(a)



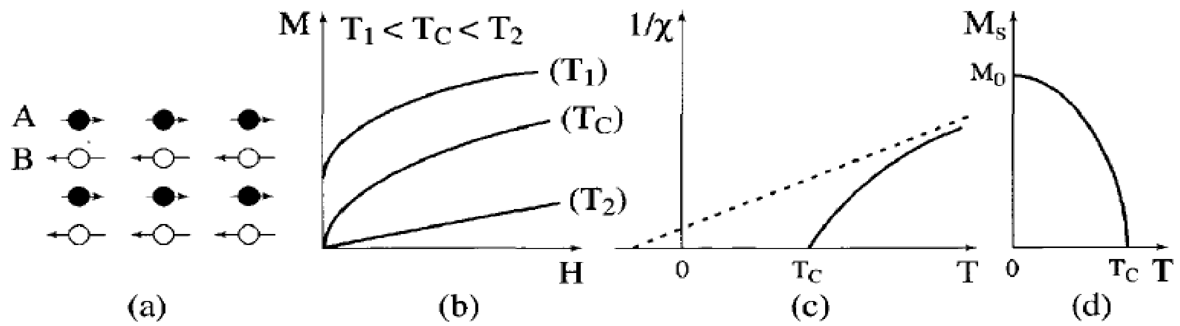
(b)



<u>الشكل(1-5):</u> المغناطيسية الحديدية؛ (a) يمثل الخصائص المغناطيسية ذات درجة الحرارة المنخفضة للعناصر النقية في الحالة الصلبة، (b) يبين الرسم البياني لمتوسط العزم المغناطيسي بدلالة عدد إلكترونات التكافؤ(بيان Slater)[6].

- **الفيريمغناطيسية (*Ferrimagnétisme*):** الفيريمغناطيسية هي الخاصية التي تميز المواد ذات الطبيعة المغناطيسية الحديدية المضادة (ضد الفيرومغناطيسية). هذه المواد التي تمتاز بخاصية الفيريمغناطيسية تتكون من شبكتين تحتيتين، عزومهما المغناطيسية غير متساوية.

على المستوى المجهري المواد الفيريمغناطيسية تكون تقريبا مماثلة للمواد المغناطيسية الحديدية (الفيرومغناطيسية).



***الشكل (1-6):** الفيريمغناطيسية (Ferrimagnétisme) ؛ (a) شبكة من العزوم الفيريمغناطيسية المتوازية المتعاكسة والغير متساوية، (b) يمثل تغيرات المغنطة تحت تأثير حقل مغناطيسي خارجي، (c) تغيرات مقلوب الحساسية بدلالة درجة الحرارة، (d) تغيرات المغنطة التلقائية بدلالة درجة الحرارة.*

إن المغنطة في الشبكتين تكون متعاكسة وغير متساوية (على عكس المادة ضد الفيرومغناطيسية)، ونتيجة لذلك فإنه عندما تكون درجة الحرارة أقل من درجة حرارة Curie (T_c)، نلاحظ وجود مغنطة تلقائية (الشكل (1-6-b)، (1-6-d)) بحيث تكون الخصائص العيانية للمادة الفيريمغناطيسية في هذا النطاق من درجة الحرارة مشابهة بشكل لافت للنظر لخصائص المادة المغناطيسية الحديدية (الفيرومغناطيسية). تجدر بنا الإشارة هنا إلى أن المغنطة التلقائية للمواد المغناطيسية الحديدية (الفيرومغناطيسية) تتغير بسرعة أكبر من تلك الموضحة في الشكل (1-6-d) [4].

II. تفاعل التبادل:

تفاعل التبادل المباشر بين عزمين مغناطيسيين في مادة صلبة له نفس الأصل الكمي للتفاعل الذي يحدث بين الإلكترونات داخل الذرة. في الواقع عند النظر على مستوى إلكترونين، فإن ارتباطات عزوم هذين الإلكترونين تؤدي إلى اختلاف في طاقة عزوم البنيات المتعاكسة والغير متعاكسة، وهذا ناتج أساسا من مبدأ باولي الذي ينص على أنه لا يمكن لإلكترونين أن يشغلا نفس الحالة الكمية [6].

يعطى هاميلتوني النظام المكون من هذين الإلكترونين بـ:

$$\mathcal{H} = -J_{12}\vec{S}_1.\vec{S}_2 \qquad (3-1)$$

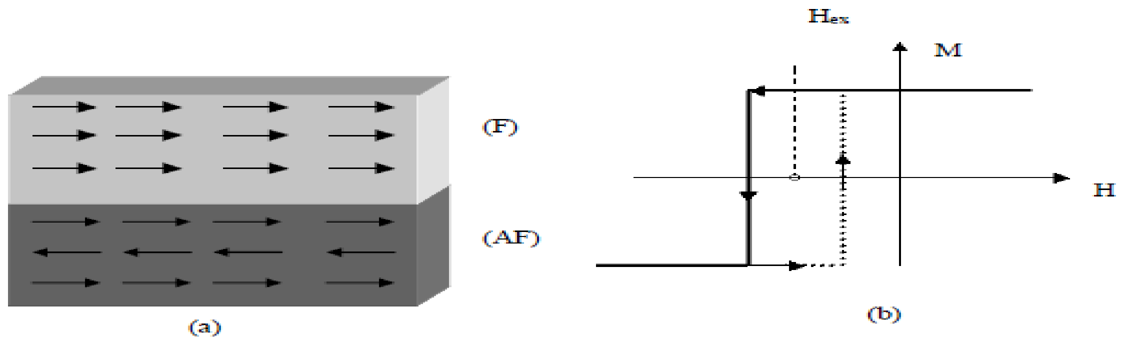
حيث: J_{12} ثابت التأثير المتبادل بين العزوم $\vec{S}_1$ و$\vec{S}_2$. ويكون هذا الثابت سالبا إذا كانت العزوم المغناطيسية للطبقات داخل البنية المتعاكسة، ويكون موجبا عندما تكون العزوم المغناطيسية للطبقات داخل البنية في نفس الاتجاه .

هذا التفاعل بين العزوم ينتج بسبب التداخل بين وظائف الموجة (الحقل المطبق) المسلطة على النظام. ويمكن اعتباره تقريبًا أوليا يعني أنه يقتصر فقط على الذرات الأولى المجاورة، وهو ناتج عن ترابط العزوم المغناطيسية الذرية. إن

الإلكترونات ككل هي المسببة لهذا النوع من التفاعل في المعدن، أما بالنسبة للمعادن الانتقالية فإن إلكترونات الطبقة 3d التي تحتوي على العزوم المغناطيسية هي المسؤولة. وفي حالة المعادن الترابية النادرة ينشأ تفاعل التبادل من إلكترونات التوصيل (s، p وd)، بينما تكون إلكترونات الطبقة 4f هي مصدر المغناطيسية. ولهذا السبب، يكون تأثير التبادل في المعادن الترابية النادرة أقل منه في المعادن الانتقالية.

II.1. التأثير المتبادل المباشر:

من أنواع التأثير المغناطيسي المتبادل للإلكترونات المسايرة: التأثير المتبادل المباشر الذي ينشأ بين المواد المغناطيسية الحديدية (F) والمواد المغناطيسية الحديدية المضادة (AF) من خلال التفاعل المباشر بين عزوم السطوح البينية. وقد ظهر هذا التأثير لأول مرة على مستوى الكوبالت Co المؤكسد جزئياً، وتم تفسيره كنتيجة تفاعل التبادل في السطح البيني بين طبقة الكوبالت المغناطيسية الحديدية وطبقة الكوبالت المؤكسدة المغناطيسية الحديدية المضادة. حيث تميل العزوم المغناطيسية السطحية إلى التنظيم بشكل متوازي. يمكن ملاحظة هذا التأثير فقط من خلال الدراسة في المجال الحراري الأقل من درجة حرارة Curie (T_c) للمواد المغناطيسية الحديدية وأعلى من درجة حرارة Néel (T_N) للمواد المغناطيسية الحديدية المضادة ويكون هذا تحت تأثير مجال مغناطيسي [7].



الشكل (1-7): *يبين تمثيل تأثير التبادل المباشر بين طبقة مغناطيسية حديدية (F) وطبقة مغناطيسية حديدية مضادة (AF) [7].*

III. تباين المناحي المغناطيسي:

طاقة تباين المناحي المغناطيسية هي خاصية فيزيائية مهمة في التطبيقات التكنولوجية مثل التسجيل المغناطيسي، أين تكون المغنطة مثبتة في اتجاه واحد معين من الفضاء. وتعرف أيضا بأنها فرق الطاقة اللازم لتغيير اتجاه المغنطة من الاتجاه السهل إلى الاتجاه الصعب.

في الحالة العامة يكون المصدر الرئيسي لهذه الطاقة هو تباين مناحي البلورة المغناطيسية. وهذا الأخير له علاقة بالتنافس بين تأثير عزم-مدار والحقل البلوري الذي توجد فيه الذرة، حيث في الأنظمة التي يكون فيها تأثير عزم-مدار أقوى من الحقل البلوري يأخذ اتجاه العزم المداري (الذي يملك أعلى قيمة) اتجاها محاذيا للعزم المغناطيسي، كما هو الحال في المعادن الترابية النادرة. أما في حالة الحقل البلوري القوي، فإنه يتم تفضيل اتجاهات معينة فقط بالاعتماد على محور عدم التماثل القوي (محاور المغنطة السهلة).

تعتمد خواص تباين المناحي على التناظر المحلي للحقل البلوري، ويكون ضعيف حين يكون التناظر كبير. على سبيل المثال في التناظر المكعبي لـ Ni (fcc) أوFe (cc) توجد عدة محاور للمغنطة السهلة، أما في التناظر السداسي لـ Co (hcp) يوجد محور واحد فقط للمغنطة السهلة. يتم التعبير عن طاقة تباين مناحي البلورة المغناطيسية بالمعادلات التالية:

$$E^{cub} = K_1.(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2.\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2 \quad (4-1)$$

$$E^{hex} = K_1.sin^2\theta + K_2.sin^4\theta \quad (5-1)$$

حيث: K_1، K_2: ثوابت تباين المناحي التي تعتمد على درجة الحرارة.

α_1،α_2 و α_3: هي معاملات التوجيه.

θ: الزاوية بين اتجاه المغنطة ومحور التماثل الأعلى (المحور c للبنية hcp).

في الطبقات الرقيقة (les couches minces) أظهر Bruno (1989) أن الزيادة في تباين المناحي ترتبط بتناظر الذرات السطحية المنخفض [8].

IV. منحنى حلقة الهسترة وبعض المقادير الفيزيائية المميزة للمواد الفيرومغناطيسية:

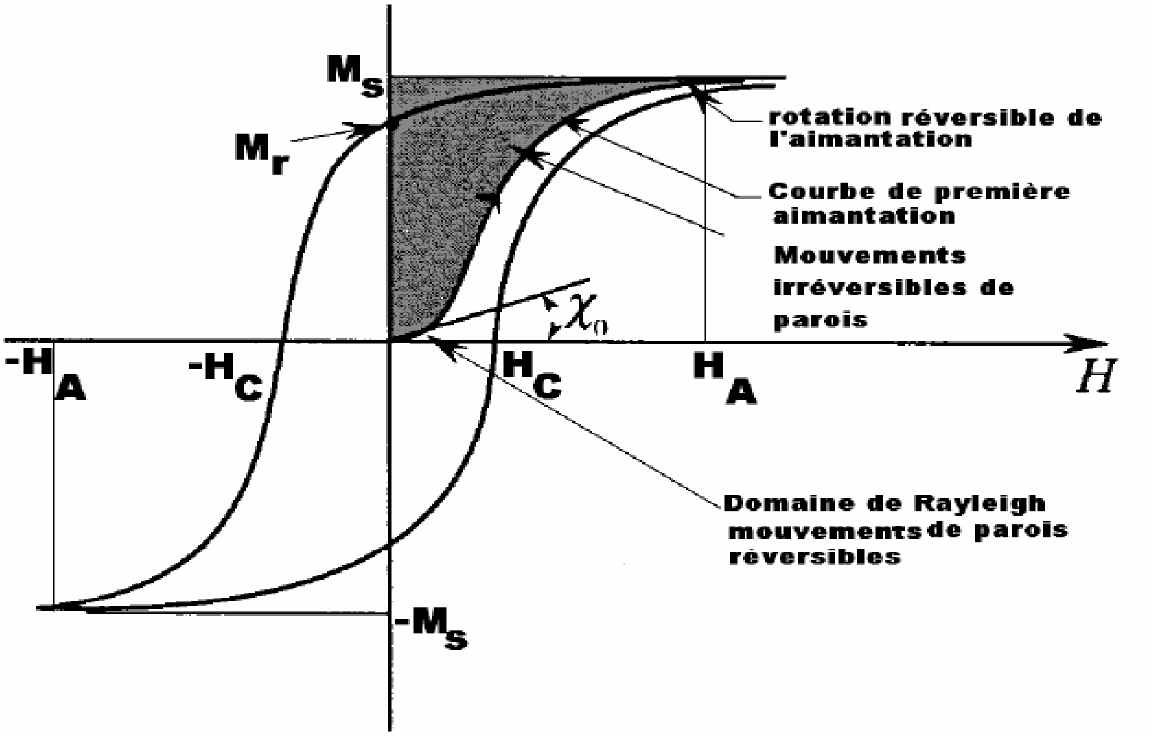
تحتوي المواد المغناطيسية الحديدية على عدد كبير من النطاقات المغناطيسية العشوائية تفصلها جدران تسمى بجدران Bloch، يمكن أن نلاحظ أن هذه المواد لا تمتلك خاصية التمغنط، ولكن عند تطبيق حقل مغناطيسي خارجي عليها تبدأ هذه النطاقات بالاختفاء تدريجيا مما يخلق اتجاه مغنطة وحيد وبالتالي ظهور خاصية التمغنط فيها [9]. حيث إذا كان الحقل المطبق سالب تكون عملية إزاحة الجدران عكوسة وبالتالي تكون تغيرات المغنطة أيضا عكوسة.

إن العلاقة بين الحقل المغناطيسي الخارجي المطبق (H_{app}) ومغنطة المواد الفيرومغناطيسية (منحنى تغيرات المغنطة M بدلالة H_{app}) (الشكل (1-8))، ينتج عنها ما يسمى بحلقة الهسترة أو التخلفية (ومعنى كلمة hysteresis مشتق من hystery أي التاريخ أو زمن التخلف) والهدف من هذه التسمية أن الاستجابة للحقل المسلط ليست مطلقة، فعند انخفاض الحقل المطبق إلى الصفر نلاحظ أن المغنطة لا تؤول إلى الصفر، حيث تكون لها قيمة معينة ولا تنعدم إلا بتطبيق الحقل الخارجي في الاتجاه المعاكس، أي يوجد تخلف بالاستجابة للحقل المسلط [10].

تتميز حلقة الهسترة بالمتغيرات الفيزيائية التالية:

- **مغنطة التشبع $\mathbf{M_S}$:** يقصد بحالة التشبع أن جميع عزوم المادة تأخذ اتجاه واحد وتصبح المادة عبارة عن نطاق واحد (مجال واحد)، تختلف قيمة هذه المغنطة باختلاف نوع وطبيعة المادة، ويتم استخدام المواد الفيرومغناطيسية في العديد من التطبيقات التكنولوجية حسب قيمة هذه المغنطة.
- **المغنطة المتبقية $\boldsymbol{M_r}$:** يتم الحصول على هذه المغنطة عن طريق تخفيض قيمة الحقل المغناطيسي المطبق إلى أن تنعدم ($H_{app} = 0$)، أي تصبح لدينا قيمة معينة للمغنطة رغم انعدام الحقل، وهي ما تسمى بالمغنطة المتبقية M_r، ويمكن تفسيرها مجهريا بأن العينة تبقي على بعض العزوم المغناطيسية في اتجاه الحقل المطبق، وهي تلعب دور مهم من الجانب التطبيقي.

- **الحقل القسري H_c:** ويعرف بأنه الحقل المغناطيسي الذي يطبق في الاتجاه المعاكس لإزالة المغنطة المتبقية، وتختلف قيمة هذا الحقل من مادة إلى أخرى وذلك حسب البنية وشروط التجربة. حيث أن في المواد الفيرومغناطيسية الصلبة تكون قيمة الحقل القسري كبيرة جدا على عكس المواد الفيرومغناطيسية اللينة.
- **المساحة أو ما يعرف بمنطقة Rayliegh:** تختلف هذه المساحة من مادة إلى أخرى، حيث إذا كانت هذه المساحة ضيقة وصغيرة فإن الضياع في الطاقة صغير جدا وتكون قيمتا المغنطة المتبقية والحقل القسري صغيرتان والعكس صحيح.



الشكل (1-8): *يمثل الشكل منحني حلقة الهسترة لمادة مغناطيسية حديدية. تم الحصول على هذه الحلقة عن طريق تطبيق حقل مغناطيسي H_{app} متغير [11].*

يختلف شكل حلقة الهسترة من مادة إلى أخرى وذلك حسب طريقة استجابة هذه المادة للحقل المغناطيسي المطبق، حيث يمكننا من خلال شكل هذه الحلقة أن نعرف اتجاه المغنطة إن كان سهلا أو صعبا، إذ أن الاتجاه الصعب يتميز بصعوبة وصول المادة إلى حالة التشبع وبالتالي يكون شكل الحلقة شديد الانحدار، والعكس إذا كان اتجاه المغنطة هو الاتجاه السهل فإننا نحصل على حلقة مربعة الشكل.

المراجع:

[1]. *Meyer and Zeller, Platonis Opera (1839)989.*

[2]. *S. Chikazumi, « Physics of Ferromagnetism ». Edition: OXFORD University Press, (1997) 7,8.*

[3]. *E.P Wolhlfarth, « Handbook of Magnetic Materials, volume 3». Edition: North-Holland Publishing Company, (1982)3-7.*

[4]. *Etienne du Trémolet de Laucheisserie, « Magnétisme Fondements ». Edition: EDP sciences, (2000)89-94.*

[5]. *س. دغولاس جيانكولي، الفيزياء المبادئ والتطبيقات. دار العبيكان.*

[6]. *J. M. D. COEY, Magnetism and Magnetic Materials, Edition Cambridge, (2010)p151.*

[7]. *T. Elbahraoui, « Etude des propriétés structurales magnétiques et de transport des couches minces et multicouches CoxZn1-x; (CoxZn1-x/Cu; Co)n, préparées par électrodéposition ». Thèse de l'université MOHAMMED V, Maroc (2007).*

[8]. *P. Bruno, Phys.Rev.B.**39**(1989)865.*

[9]. *Ph. Robert, "Matériaux de l'électrotechnique", Traité d'électricité, Presse Polytechniques, Romandes, Lien, Troisième Edition, (1989).*

[10]. *خير سليمان شواهين، الكهرومغناطيسية تجارب وانشطة وهوايات.*

[11]. *J. Degauque; Magnétisme et matériaux magnétiques: introduction, Laboratoire de Physique des Solides, associé au CNRS, LNSA. Complexe Scientifique de Ranguergueri, (1992).*

الفصل الثاني

مقدمة:

في 1925 ظهرت النماذج الذرية للمواد المغناطيسية التي لها ذرات تمتلك عزوم مغناطيسية لحظية كالنموذج الأولي لـ Ising. يهتم هذا النموذج بدراسة عزم في الاتجاه الأعلى وعزم في الاتجاه الأسفل وتكون هذه الدراسة بالنسبة للمواد المغناطيسية الحديدية (الفيرومغناطيسية) ذات بعدين. لا يزال يُستخدم هذا النموذج على نطاق واسع في دراسة المرحلة الانتقالية للمواد الفيرومغناطيسية [1] وفي التطبيق عليها، لكن لا يمكن استخدامه في عمليات المحاكاة الديناميكية. التوسع في هذا النموذج يسمح لعزم الذرة الذي يخضع لنموذج Heisenberg الكلاسيكي بالتحرك بحرية في الفضاء ثلاثي الأبعاد [3،2].

إن محاكاة Monte Carloالمعتمدة على نموذج Heisenberg الكلاسيكي تسمح بدراسة تغير الأطوار والسطوح والأنظمة ذات حدود منتهية للجملة المغناطيسية البسيطة. ولقد تطورت دراسة الجمل الديناميكية بتطور نظريات الإحصاء العشوائي والمتمثلة في نموذج Landau-Lifshitz-Gilbert للعزوم الذرية [4-8]. المحاكاة الذرية للمواد المغناطيسية أصبحت اليوم أداة أساسية في فهم العمليات التي تحكم السلوك المعقد للمواد المغناطيسية المتناهية الصغر، الذي تسببه ديناميكيات المغنطة بما في ذلك الليزر فائق السرعة [9-11]، exchange bias في الجزيئات [12-14]، تعدد الطبقات [5،15]، تباين المناحي السطحي [16،17]، تأثير البنية المجهرية [18-20]، سبين الصمامات (spin valve) [21]، عزم الدوران [22]، تأثير درجة الحرارة وخصائصها [23-26] وأخيرا مغناطيسية وسائط التسجيل [27،28].

تكمن أهمية النموذج الذري في الربط بين حسابات Ab initio الإلكترونية والميكرومغناطيسية، وذلك باستخدام نموذج متعدد الوسائط [29-32]. هذا النموذج قادر على حساب المعاملات المغناطيسية الفعالة على أكبر نطاق لمحاكاة المغنطة المجهرية [33]، مثل تباين المناحي ومعاملات التفاعل البيني [34]. وهو قادر أيضا على المرور من المحاكاة الميكرومغناطيسية إلى معالجة الأنظمة الموسعة عن طريق حساب خصائص السطوح البينية [35،36].

على الرغم من التطبيق الواسع وأهمية النماذج الذرية إلا أنه لا توجد حزم برامج سهلة الاستخدام ومفتوحة المصدر متاحة للباحثين في الوقت الحاضر، بخلاف منظار التقريب الميكرومغناطيسي، أين توجد فيه عدة حزم متاحة [37،38]. ويتم اليوم تنفيذ معظم النمذجة المغناطيسية باستخدام هذا التقريب.

I. نموذج العزم الذري:

الأساس الفيزيائي لنموذج العزم الذري هو تموقع الإلكترونات الفردية الحرة في المواقع الذرية التي تمتلك عزوم مغناطيسية ذرية محلية. تموقع هذه الإلكترونات كان دائما مشكلة مثيرة للجدل في المعادن ذات الطبقة 3d [39]، بسبب مغناطيسية الإلكترونات الخارجية التي ترتبط بشكل حر بالذرات.

الأنظمة المغناطيسية هي أنظمة ذات طبيعة كمية لأن مستويات الطاقة في الإلكترونات مكممة (تفاعل التبادل البيني وتباين المناحي البلوري هي مؤثرات مهمة في ميكانيك الكم)، وبالإضافة إلى هذه الخصائص على المستوى الإلكتروني خصائص المواد المغناطيسية التي تتأثر بشكل كبير بالحرارة والتي عادة ما يتم دمجها في المنهج النظري للكثافة الوظيفية. لذلك فإن نماذج المواد المغناطيسية يجب أن تجمع بين خصائص ميكانيك الكم والخصائص الديناميكية الحرارية.

إن أبسط نموذج في المغناطيسية هو نموذج Ising [1]الذي يسمح للعزم الذري أن يأخذ حالة من الحالتين الموجودة على المحور الكمي، وعلى الرغم من أن هذا النموذج مفيد كنظام وصفي إلا أن التكميم القوي الذي يعادل تباين المناحي اللانهائي يحد من تطبيقاته فيما يتعلق بالمواد الحقيقية. في الوصف الكلاسيكي اتجاه العزم الذري متغير مستمر في الفضاء ثلاثي الأبعاد (3D).

1.I. هاميلتون العزم الكلاسيكي:

يتضمن نموذج Heisenberg للعزم الأساس الفيزيائي للمواد المغناطيسية على المستوى الذري، حيث أن طاقة نظام تفاعل العزوم الذرية تعطى من هاميلتوني العزم (بإهمال التأثيرات غير المغناطيسية مثل حد كولوم) الذي يعطى عادة على الشكل:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{exc} + \mathcal{H}_{ani} + \mathcal{H}\ _{app} (1-2)$$

حيث أن:

$\mathcal{H}_{exc}$: تمثل حقل تبادل التفاعل.

$\mathcal{H}_{ani}$: تمثل حقل تباينالمناحي المغناطيسي.

$\mathcal{H}_{app}$: تمثل الحقل المغناطيسي المطبق.

إن الحد الأساسي في هاميلتوني العزم هو حقل تبادل التفاعل لـHeisenberg والذي ينشأ بسبب التناظر في دالة الموجة الإلكترونية الخاضعة لمبدأ الاستبعاد لباولي [39]، وهو يتحكم في اتجاه العزم الإلكتروني في المدارات الإلكترونية المتداخلة.

طاقة التبادل لنظام تفاعل العزوم الذرية تعطى بالعبارة:

$$\mathcal{H}_{ext} = -\sum_{i \neq j} J_{ij} \overrightarrow{S_i} \cdot \overrightarrow{S_j} \qquad (2-2)$$

J_{ij}: ثابت تفاعل التبادل بين ذرتين متموقعتين في i و j.

$\overrightarrow{S_i}$: شعاع الوحدة الذي يبين الاتجاه المحلي للعزم.

$\overrightarrow{S_j}$: اتجاه العزم اللحظي للذرات المجاورة.

تؤخذ أشعة الوحدة من العزم الذري اللحظي μ_s وتعطى بـ: $\overrightarrow{S_i} = \frac{\overrightarrow{\mu_s}}{|\overrightarrow{\mu_s}|}$.

من المهم أن نلاحظ أهمية إشارة J_{ij} فهي بالنسبة للمواد الفيرومغناطيسية ذات عزوم الذرات المتجاورة المتوازية والتي لها نفس الاتجاه موجبة ($J_{ij} > 0$)، على عكس المواد ضد الفيرومغناطيسية التي عزوم ذراتها المتجاورة متعاكسة فإن: $J_{ij} < 0$. وهذا راجع إلى أن طاقة تفاعل التبادل تتعلق بالمسافة بين الذرات. يكون المجموع في المعادلة (2-2)غير مستمر، ليقتصر فقط على الجوار الاقرب. هذه الملاحظة اختصرت الحساب حتى أصبح يُعتمد كتقريب جيد للعديد من المواد المهمة. في الواقع يمكن أن يمتد تفاعل التبادل ليشمل حتى الذرات البعيدة [29،30]التي تعبر عن المئات من التفاعلات الثنائية.

في الحالة البسيطة تفاعل التبادل J_{ij} عشوائي،هذا يعني أن طاقة التبادل لعزمين تتعلق فقط باتجاههم النسبي، وهو في المواد الأكثر تعقيدا يشكل Tenseurمركباته:

$$\overrightarrow{J_{ij}^{M}} = \begin{bmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{yx} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{zx} & J_{zy} & J_{zz} \end{bmatrix} \qquad (3-2)$$

حيث أنه قادر على وصف تفاعل تبادل تباين المناحي، مثل تباين المناحي لشاردة ثنائية [29] وتفاعل-Dzyaloshinskii Moriya. في حالة التبادل التنسوري H_{exc}^{M}، طاقة التبادل تعطى بـ:

$$\mathcal{H}_{exc}^{M} = -\sum_{i \neq j} \begin{bmatrix} S_x^i & S_y^i & S_z^i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{yx} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{zx} & J_{zy} & J_{ZZ} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_x^j \\ S_y^j \\ S_z^j \end{bmatrix} (4-2)$$

يمكن الحصول على مركبات مؤثر التبادل من الناحية الظاهرية أو باستخدام طريقةAb initio.

عندما تؤدي طاقة التبادل إلى التنظيم المغناطيسي على المستوى الذري، فإن استقرار المادة المغناطيسية يكون مهيمنا عليه تباين المناحي المغناطيسي. هناك العديد من التأثيرات الفيزيائية التي تخلق أنواع من تباين المناحي، وأهمه تباين المناحي للشبكة البلورية (يعني أن الاتجاه المفضل للعزوم يكون بمحاذاة محاور البلورات الخاصة)، وهذا الأخير ناتج عن التفاعل عزم-مدار والحقل البلوري [41،40].

أبسط شكل من أشكال تباين المناحي هو الناتج عن شاردة منفردة أحادية المحور، حيث تفضل العزوم المغناطيسية أن تكون بالمحاذاة معه. يسمى هذا المحور بالمحور السهل وهو تفاعل يتعلق بالعزوم المحلية. تباين المناحي أحادي المحور هو الأكثر ظهورا في الجسيمات ذات الشكل الطولي (تباين مناحي الشكل)، أو ذات البنية البلورية المشوهة على طول المحور الأحادي، كما هو الحال بالنسبة للمواد التالية: الكوبالت سداسي الأوجه، وعينة FePt المنظمة.

تعطى طاقة تباين المناحي لأيون منفرد أحادي المحور بـ:

$$\mathcal{H}_{ani}^{uni} = -k_u \sum_i \left(\overrightarrow{S_i}.e\right)^2 \; (5-2)$$

k_u: طاقة التباين المغناطيسي لكل ذرة.

المواد ذات البنية البلورية المكعبة مثل الحديد FeوالنيكلNi لها شكل مختلف من تباين المناحي، والذي يسمى بتباين المناحي المكعبي. وهو عموما أضعف بكثير من تباين المناحي أحادي المحور، حيث لديه ثلاث محاور رئيسية للمغنطة: محور سهل ومحور متوسط والثالث صعب. يعطى تباين المناحي المكعبي بالعبارة:

$$\mathcal{H}_{ani}^{cub} = \frac{k_c}{2} \sum_i \left(S_x^4 + S_y^4 + S_z^4\right) (6-2)$$

حيث:

S_x ، S_y و S_z:مساقط عزم السبين على المحاور x،y و z على الترتيب.

k_c: طاقة تباين المناحي المكعبي لكل ذرة.

إن معظم المشاكل المغناطيسية ناتجة عن التفاعل بين النظام والحقول الخارجية المطبقة$\vec{H}_{app}$، التي يمكن أن تنشأ بعدة طرق، على سبيل المثال وجود مادة مغناطيسية بالجوار أو وجود حقل ناتج عن تيار كهربائي. وفي جميع الحالات يتم إعطاء عبارة طاقة الحقل المطبق بالشكل التالي:

$$\mathcal{H}_{app} = -\sum_{i} \mu_s . \vec{S_\iota} . \vec{H}_{app} (7-2)$$

2.I. ملاحظات حول الوحدات المغناطيسية:

إن موضوع الوحدات المغناطيسية مثير للجدل بسبب وجود معايير منافسة، متعددة وذات أصول تاريخية[39].حيث أن أبعاد الوحدات في المستوى الذري هي أبعاد واضحة، وعادة ما يتم حساب مضاعفات العزم المغناطيسي انطلاقا من مغناطور*Bohr*(μ_B). وحدة العزم المغناطيسي لإلكترون معزول تعطى بـ$Joule\ Tesla^{-1}$. بالاعتماد على عدد ذرات العزم μ_sفي وحدة الحجم يعطىالعزم في وحدة الحجم بـ $JT^{-1}m^{-3}$، وهذه الوحدة معرفة في النظام الدولي *SI* بـAm^{-1}.

يتم حساب الحقول المغناطيسية المطبقة بـ*Tesla*، التي تأتي طبيعيا من مشتق هاميلتوني العزم مع احترام العزم المحلي، وحدة التسلا *Tesla*أيضا مهمة في حلقات الهسترة*(cycles d'hystérésis)* منذ أن أُعتبرت المساحة النموذجية للحلقة ككثافة للطاقة ($Joules\ m^{-3}$). بعض المتغيرات، المعاملات المغناطيسية ووحداتها موضحة في الجدول (2-1).

المتغير	**رمزه**	**وحدته**
العزم المغناطيسي الذري	μ_s	*Joules/Tesla*$[JT^{-1}]$
خلية الوحدة	*a*	*Angstroms*$[\text{Å}]$
طاقة التبادل	J_{ij}	*Joules/link*$[J]$
طاقة تباين المناحي	K_u	*Joules/atom*$[J]$
الحقل المطبق	*H*	*Tesla*$[T]$
درجة الحرارة	*T*	*Kelvin*$[K]$
الزمن	*T*	*Seconds*$[s]$
المعامل	**رمزه**	**قيمته**
مغناطور*Bohr*	μ_B	$9.2740 \times 10^{-24} JT^{-1}$
النسبة الجيرو مغناطيسية	γ	$1.76 \times 10^{11} T^{-1} s^{-1}$
نفاذية الفراغ	μ_0	$4\pi \times 10^{-7} T^2 J^{-1} m^3$
ثابت *Boltzmann*	k_B	$1.3807 \times 10^{-23} JK^{-1}$

الجدول (2-1): *جدول لبعض المتغيرات ووحداتها.*

II. تعيين نظام الوحدات:

II.1. العزم الذري:

العزم الذري μ_s يتعلق أساسا بقيمة مغنطة التشبع M_s[42]، ويعطى على الشكل :

$$\mu_s = a^3 \frac{M_s}{n_{at}} \quad (8-2)$$

M_s: مغنطة التشبع عند الصفر المطلق (0K).

a: بعدخلية الوحدة الأساسية تعطى بالمتر(m).

n_{at}:عدد الذرات في وحدة الخلية.

نلاحظ أيضا أنه في المضاعفات أو الكسور يتم التعبير عن العزم الذري بمغناطور($\text{Bohr}\mu_B$)، بسبب خصائصه الإلكترونية. نأخذ كمثال: الحديد ذو البنية المكعبة الممركزة الجسم (bcc) عند T=0K،مغنطة تشبعه: $M_s =$ $1.75\,MA/m$ [43] وبُعد خليته الأساسية: $a = 2.866\text{Å}$ هذه القيم تعطي قيمة العزم الذري: $\mu_s =$ $2.22\,\mu_B/atom$.

II.2. طاقة التبادل:

بالنسبة للنماذج الذرية العامة التي تهتم بتفاعلات الجوار الأقرب z فقط، يعطى ثابت التبادل [42]بالعلاقة التالية:

$$J_{ij} = \frac{3k_B}{\epsilon z} T_c \quad (9-2)$$

حيث:

k_B: ثابت بولتزمان.

T_c: درجة حرارة Curie.

z: عدد الجوار الأقرب.

ϵ:معامل تصحيح مرتبط بالشبكة البلورية [44]، وهو بالتقريب يساوي 0.86.

نأخذ على سبيل المثال: الكوبالت Co ذو البنية السداسية، حيث$\mathrm{T}_c = 1388K$ و$z = 12$،وهذا يعطي طاقة تفاعل تبادل الجيران الأقرب التالية:$\mathrm{J}_{ij} = 6.064 \times 10^{-21}\,J/link$.

II.3. طاقة تباين المناحي:

تباين المناحي للشبكة المغناطيسية الذرية k_u مشتق من ثابت تباين المناحي العيانيK_u، يعطى بالعبارة التالية:

$$k_u = \frac{K_u}{n_{at}} a^3 \qquad (10-2)$$

حيث:K_u يعطى ب J/m^3.

بالإضافة إلى المعاملات الذرية، من الجدير بنا أيضا ذكر عبارة حقل تباين المناحي H_a بالنسبة لجزيئة أحادية النطاق:

$$H_a = \frac{2K_u}{M_s} = \frac{k_u}{\mu_s} (11-2)$$

حيث الرموز لها نفس المعنى المعتاد.

وعند هذه النقطة يجب الإشارة إلى أن تباين المناحي هو عبارة عن طاقة حرة. في حين تبقى k_u (كتقريب أولي) مستقلة عن درجة الحرارة، في درجة الحرارة غير المعدومة الطاقة الحرة في الاتجاه السهل /الصعب تزداد / تنخفض بسبب تقلبات المغنطة. وبالتالي قيمة تباين المناحي العياني تتناقص بزيادة درجة الحرارة وتنعدم عند T_c.الأساس الديناميكي الحراري للنماذج الذرية يجعل هذه الأخيرة مناسبة للغاية للتحقق من الظواهر المغناطيسية، كما سيظهر لاحقا.

بتطبيق العمليات السابقة نتحصل على معاملات العناصر المغناطيسية الحديدية(الفيرومغناطيسية). وهي معطاة في الجدول (2-2).

الوحدة	Gd	Ni	Co	Fe	
—	hcp	fcc	hcp	bcc	بنية الشبكة
Å	3.636	3.524	2.507	2.866	خلية الوحدة الأساسية a
Å	3.636	2.492	2.507	2.480	المسافة البينية r_{ij}
—	12	12	12	8	عدد الروابط z
K	293	631	1388	1043	درجة حرارة Curie
—	0.790	0.790	0.790	0.766	تصحيح موجة العزم MF
μ_B	7.63	0.606	1.72	2.22	عزم السبين الذري μ_S
J/link	1.280×10^{-21}	2.757×10^{-21}	6.064×10^{-21}	7.050×10^{-21}	طاقة التبادل J_{ij}
J/atom	5.93×10^{-24}	5.47×10^{-26}	6.69×10^{-24}	5.65×10^{-25}	طاقة تباين المناحي k

الجدول (2-2):جدول بعض الثوابت الخاصة بالعناصر المغناطيسية الحديدية Fe، Co، Ni و Gd.

III. ديناميكية العزم:

إن أول مفهوم لديناميكية العزم جاء عن طريق تجربة الرنين الفيرومغناطيسي، الذي يعتمد على الزمن في وصف المواد المغناطيسية، ويعتمد كذلك على مشتق معادلة Landau-Lifshitz [45] التي تعطى بـ:

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial t} = -\gamma\left[\vec{m} \times \vec{H} + \alpha \vec{m} \times \left(\vec{m} \times \vec{H}\right)\right](12-2)$$

حيث:

$\vec{m}$: شعاع الوحدة، يصف اتجاه مغنطة العينة.

$\vec{H}$: الحقل المغناطيسي الفعلي المطبق على العينة.

γ: النسبة الجيرومغناطيسية.

α: ثابت التخامد، وهو خاصية ذاتية للمادة.

الأصل الفيزيائي لمعادلة Landau-Lifshitz ينص على أنها نشأت بسبب تأثيرين فيزيائيين مهمين:

- حركة الترنح للعزم المغناطيسي (الحد الأول من المعادلة (2-12))، والتي نشأت بسبب التفاعل بين العزم الذري والحقل المغناطيسي المطبق.
- استرخاء المغنطة (الحد الثاني من المعادلة (2-12))، تمثل الصيغة الابتدائية لطاقة النقل، والتي هي عبارة عن مزدوجة المغنطة المعرفة ب α.

في معادلة LL: معدل استرخاء المغنطة في اتجاه الحقل هو عبارة عن دالة خطية لمعامل التخامد الذي بيَّنه Gilbert، التي تعطي ديناميكيات غير صحيحة للمواد ذات التخامد العالي [46]. بعد ذلك أدخل Gilbert مفهوم التخامد الحرج ووضع كقيمة قصوى له $\alpha = 1$للوصول إلى معادلةLandau-Lifshitz-Gilbert الجديدة(LLG).وعلى الرغم من اشتقاق معادلة LL في البداية لوصف ديناميكيات المغنطة العيانية للعينة، إلا أن معادلة LLG هي المعادلة القياسية للحركة المستخدمة في الميكرومغناطيسية العددية لوصف ديناميكيات العناصر المغناطيسية الصغيرة.

ويمكن أيضا أن تُطبق نفس معادلة الحركة على المستوى الذري. حيث ينشأ حد التمدد من الناحية الميكانيكية الكمية وحد الاسترخاء يصف اتجاه العزم الزاوي بين العزم والحمام الحراري الذي يشمل مساهمات العزوم [47] والإلكترونات [48].

إن التمييز بين معادلةLLG العيانية ومعادلة LLG الذرية يظهر الآن من خلال التأثيرات المتضمنة داخل معامل التخامد. حيث أن معادلة LLG العيانية تشمل المساهمات الداخلية (تفاعلات عزم-الشبكة وعزم– إلكترون) والخارجية (تفاعلات عزم–عزم الناشئة عن حقل إزالة المغنطة، العيوب السطحية [49]، التطعيم [50] ودرجة الحرارة [51])، بينما معادلة LLG الذرية تقتصر فقط على المساهمات الداخلية. لتمييز مختلف مفاهيم التخامد نعرف معامل التخامد المجهري λ.

على الرغم من أن شكل LLG مطابق لمقاييس الطول الذري والمجهري، إلا أن تفاصيل البنية الدقيقة في النموذج الذري تسمح بحساب التخامد الفعال تحت وجود التأثيرات الخارجية. (على سبيل المثال المعادن الترابية (Les terresrares)المطعمة [52]).وتعطى معادلة LLG الذرية[42] بـ:

$$\frac{\partial \vec{S_i}}{\partial t} = \frac{-\gamma}{(1+\lambda^2)}\left[\vec{S_i} \times \vec{H}_{eff}^{i} + \lambda \vec{S_i} \times \left(\vec{S_i} \times \vec{H}_{eff}^{i}\right)\right] (13-2)$$

حيث:

$\vec{S_i}$: هو شعاع الوحدة، يمثل اتجاه العزم المغناطيسي في الموقع i.

γ:النسبة الجيرومغناطيسية.

$\vec{H}_{eff}^{i}$: الحقل المغناطيسي الفعال لكل عزم.

معادلة LLG الذرية تصف تفاعل العزم الذري مع الحقل المغناطيسي الفعال، الذي يتم الحصول عليه من المشتق الأول لهاميلتون العزم بالشكل التالي:

$$\vec{H}_{eff}^{i} = \frac{-1}{\mu_s}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i} \qquad (14-2)$$

حيث:

μ_s:العزم المحلي.

يتم التعبير عن الحقل بوحدة Tesla، ويعطى الهاميلتوني بالجول Joules.

1.III.ديناميكية Langevin:

تكون معادلة LLG بشكلها المنظم قابلة للتطبيق في المحاكاة عند درجة حرارة 0K. إن التأثير الحراري يسبب الديناميكية الحرارية المحركة للعزوم اللحظية والتي تكون أكبر من تفاعل التغيير عند درجات حرارة كبيرة بما فيه الكفاية، وهذا يؤدي إلى الانتقال من الخاصية الفيرومغناطيسية إلى البارامغناطيسية.

تأثير درجة الحرارة يمكن أن يؤخذ بعين الاعتبار باستخدام ديناميكية Langevin(طريقة طورها[53]Brown).إن الفكرة الأساسية وراء هذه الديناميكية هي افتراض أن التغيرات الحرارية في كل موضع ذري يمكن تمثيلها من طرف نموذج العشوائية البيضاء(white noise) لـ Gaussian، حيث يزداد عرض توزيع Gaussianالذي يمثل التقلبات الحرارية القوية عند الزيادة في درجة الحرارة. ديناميكياتLangevin المعمول بها هي طريقة تستخدم على نطاق واسع في المحاكاة الديناميكية للعزم، وفي دمج تأثير الحقل الحراري في معادلة LLG من أجل محاكاة التأثيرات الحرارية [53-55].حيث يعطى الحقل الفعال للتطبيق بـ:

$$\vec{H}_{eff}^{i} = \frac{-1}{\mu_s}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S_i}} + \vec{H}_{th}^{i} (15-2)$$

2.III. أساليب Monte Carlo:

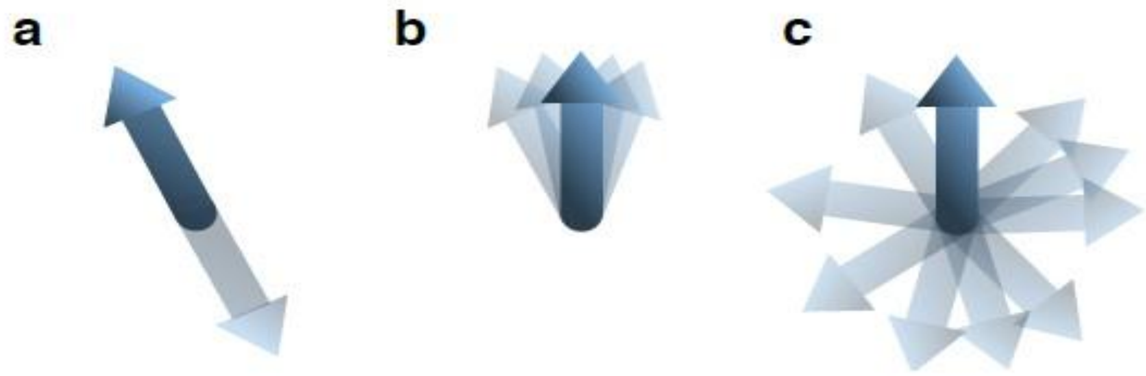
إن ديناميكيات العزوم مهمة وبشكل خاص للحصول على المعلومات الديناميكية حول الخصائص المغناطيسية أو عمليات الانعكاس لنظام ما، وهي في الأغلب ليست الطريقة المثلى لتحديد خصائص التوازن، على سبيل المثال المغنطة التي تعتمد على درجة الحرارة. إن خوارزمية Monte Carlo [56] توفر لنا طريقة طبيعية لمحاكاة تأثير درجات الحرارة، بحيث تكون الديناميكية غير مطلوبة بسبب التقارب السريع نحو التوازن والسهولة النسبية للتنفيذ.

تعطى خوارزمية Monte Carlo لنظام العزم الكلاسيكي على النحو التالي: أولا يتم اختيار عزم عشوائي i وتحديد اتجاهه الأولي$\vec{S}_i$، ثم تغييره بشكل عشوائي إلى موضع جديد$\vec{S}_i'$ (وهذا ما يسمى باحتمالية الحركة). يكون التغير في الطاقة بين الموضع القديم والجديد $\Delta E = E(\vec{S}_i') - E(\vec{S}_i)$، ويتم قبول احتمالية الحركة التي تحقق:

$$P = exp\left(\frac{-\Delta E}{k_B T}\right). \qquad (16-2)$$

عند المقارنة مع العدد العشوائي الموحد في النطاق 0-1، حيث يتم قبول الاحتمالات الأكبر من 1 الموافقة لانخفاض الطاقة دون أي قيد أو شرط، ثم يتم تكرار هذا الإجراء إلى أن تنتهي المحاولة حتىNاحتمال(N هو عدد العزوم في النظام ككل). تتضمن كل مجموعة Nخطوة واحدة لـ Monte Carlo، وتكون طبيعة الحركة المحتملة مهمة بسبب شرطين اثنين من خوارزميةMonte Carlo: ergodicity والانعكاس، لأن Ergodicity يعبر عن الشرط الذي يمكن العزم من الوصول إلى جميع الحالات الممكنة في النظام. في حين أن الانعكاس يشترط أن يكون احتمال الانتقال بين حالتين ثابت $\left(P(\vec{S}_i \to \vec{S}_i') = P(\vec{S}_i' \to \vec{S}_i)\right)$. من المعادلة (2-16) يكون الانعكاس واضح واحتمال تغيير العزم يعتمد فقط على طاقته الأولية والنهائية.

تم تطوير أحد خوارزميات Monte-Carlo الأكثر كفاءة لنماذج العزوم الكلاسيكية من قبل Hinzke وNowak[57] التي تنطوي على منهج التوافقية باستخدام العديد من احتمالية الحركات المختلفة، حيث أن الميزة الرئيسية لهذه الطريقة هي أخذ عينات فعالة من مساحة الطور ككل مع الحفاظ على محدودية محاولات الحركة (*trials moves*). تستخدم طريقة Hinzke-Nowak ثلاثة أنواع مميزة للحركة: spin-flip (العزم الموجه)، Gaussian والعشوائية، كما هو موضح في الشكل (2- 1).



الشكل (2-1): *يمثل عرض تخطيطي للحركات الرئيسية الثلاثة لـ*Monte Carlo*: (a) العزم الموجه،(b)*Gaussian *و(c) العشوائي[42].*

نلاحظ أن العزم الموجه يتحرك ببساطة وذلك بعكس اتجاهه $\vec{S}_i' = -\vec{S}_i$، وهذه الحركة مماثلة لحركة العزم في نماذج Ising، ولا تتوافق مع الشرط الذي ينص بوجوب أخذ جميع حالات النظام من طرف العزم المعمول به في نموذج العزم الكلاسيكي. حيث أن الحالات المتعامدة مع اتجاه العزم الابتدائي لا يمكن الوصول إليها، وبالرغم من ذلك، فإنه يمكن استخدام هذا الاحتمال كتركيبة مع غيره من الحركات المحتملة.

الحركة المحتملة Gaussian تأخذ اتجاه العزم الابتدائي وتكون في محيط موضعه الابتدائي بشكل مخروطي في وحدة الحجم الكروي وفقا للتعبير[42]:

$$\vec{S}_i' = \frac{\vec{S}_i + \sigma_g \vec{\Gamma}}{\left|\vec{S}_i + \sigma_g \vec{\Gamma}\right|} \quad (17-2)$$

حيث:$\vec{\Gamma}$: هو عدد التوزيعات لـ Gaussian، σ_g:هو عرض المخروط حول العزم الإبتدائي$\vec{S}_i$.

إن اختيار توزيع Gaussian يعتمد على أن للعينات شكل مخروط موحد، ويتم اختيار عرض هذا الأخير بشكل عام ليكونمتعلق بدرجة الحرارة على الشكلالمعطى في المعادلة (2-18)[42]:

$$\sigma_g = \frac{2}{25}\left(\frac{k_B T}{\mu_B}\right)^{1/5} \quad (18-2)$$

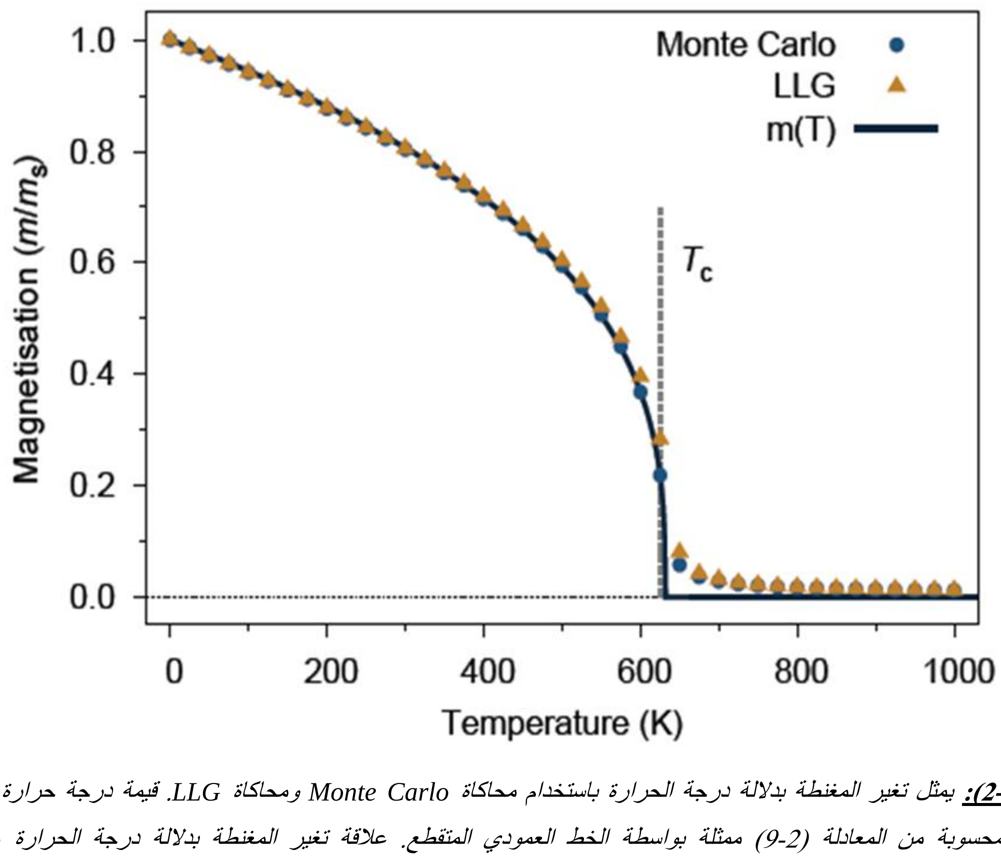
وبالتالي فإن الحركة المحتملة Gaussian تفضل زاوية صغيرة لتَغير اتجاه العزم عند درجات حرارة منخفضة.

الحركة المحتملة العشوائية تختار نقطة عشوائية في وحدة الحجم الكروي وفقا لـ [42]:

$$\vec{S}_i' = \frac{\vec{\Gamma}}{|\vec{\Gamma}|} (19-2)$$

وهذا ما يتوافق مع شرط الـergodicity لخوارزمية كاملة وجيدة وهو يضمن أخذ العينات من فضاء الحالة حتى في درجات حرارة عالية.

إن الشكل (2-2) يوضح محاكاة المغنطة بدلالة درجة الحرارة، وذلك باستخدام كل من ديناميكيات العزم LLG وطرق Monte-Carlo، حيث نلاحظ أن التوافق بين الطريقتين توافق جيد، لكن محاكاة ديناميكية العزم تأخذ مدة زمنية أكبر بعشرين مرة في الحساب بسبب متطلبات الخطوة الزمنية الصغيرة والتقريب البطيء للتوازن، ومن المعروف أن خوارزمية Monte-Carlo صعبة التماثل بالنسبة للأنظمة الكبيرة، ومنه فإن محاكاة ديناميكية العزم LLG بشكل عام أكثر كفاءة من طرق Monte-Carlo.



__الشكل (2-2):__ يمثل تغير المغنطة بدلالة درجة الحرارة باستخدام محاكاة Monte Carlo ومحاكاة LLG. قيمة درجة حرارة $Curie T_C =$ $625K$ محسوبة من المعادلة (2-9) ممثلة بواسطة الخط العمودي المتقطع. علاقة تغير المغنطة بدلالة درجة الحرارة هي: $m(T) = (1 - T/T_C)^{\beta}$ (ممثلة بالخط المستمر الأسود) التي تعطي $T_C = 631.82K$ والأس $\beta = 0.334297$ [42].

IV. اختبار المحاكاة:

لقد لخصت النظريات المهمة والطرق الحسابية طرق المحاكاة الذرية للمواد المغناطيسية، وتتم الآن مواكبة تفاصيل الاختبارات (تكامل العزم) التي أجريت على المكونات الأساسية للنموذج. إن بعض الاختبارات المماثلة التي طورت من قبل حزم الميكرومغناطيسية أضافت معيارا أساسيا لتنفيذ الخوارزميات والرموز ذات قدرات مختلفة ولكن بالحفاظ على نفس الوظيفة الأساسية.

1.IV. التغير الزاوي للحقل القسري:

بالنسبة لعزم منفرد داخل حقل مطبق ودرجة حرارة معدومة T=0Kيكون سلوك المغنطة مهم جدا لجزيئة Stoner–Wohlfarth، أما الحقل القسري فهو يتغير تغير زاوي[58]. تكامل العزم يستخدم في التحقق من الحل الثابت لمعادلة LLG من خلال ضمان أن الحلقة الخاصة بالمحور السهل تعطي الحقل القسري لحقل تباين المناحي: $H_k = 2k_u/\mu_S$ كما هو متوقع نظريا، في هذه الحالة يعطى الهاميلتوني بالشكل:

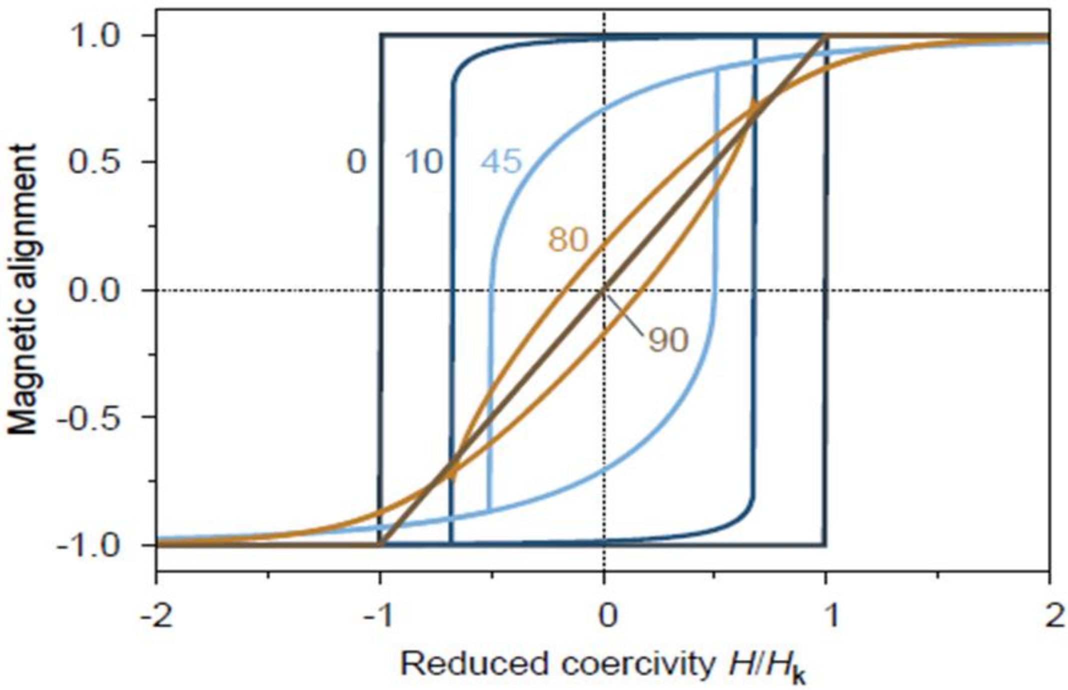
$$\mathcal{H} = -k_u S_z^2 - \mu_s \vec{S} \cdot \vec{H}_{app} (20-2)$$

حيث:

k_u:ثابت تباين المناحي أحادي المحور.

$\vec{H}_{app}$: هو الحقل الخارجي المطبق.

تتم تهيئة العزم على طول اتجاه الحقل المطبق ومن ثم يتم حل معادلة LLG للنظام، حتى التحصل على العزم المزدوج الفعلي للنظام ($\vec{S} \times \vec{H}_{eff} \leq 10^{-6}T$)، وذلك بالإعتماد على شرط الحد الأدنى للطاقة المحلية. يتم تقليل شدة الحقل بخطوة قدرها$0.01\, H/H_k$ وحل LLG مرة أخرى حتى الوصول إلى نفس الشرط. تمثيل المغنطة الموجهة المحسوبة بدلالة الحقل المطبق ($\vec{S} \cdot \vec{H}_{app}$) لمختلف زوايا المحور السهل ممثل في الشكل (2-3)، حيث نلاحظ أن منحنى الهسترة المحسوب يتطابق تماما مع حل Stoner-Wohlfarth.



الشكل(2-3): يمثل منحنى المغنطة الخطية بدلالة الحقل المطبق لمختلف زوايا المحور السهل.الحلقتين الخاصتين بالزاوية °0 والزاوية °90 تم حسابهما بالنسبة لزوايا صغيرة جدا للمحاور السهلة والصعبة على الترتيب [42].

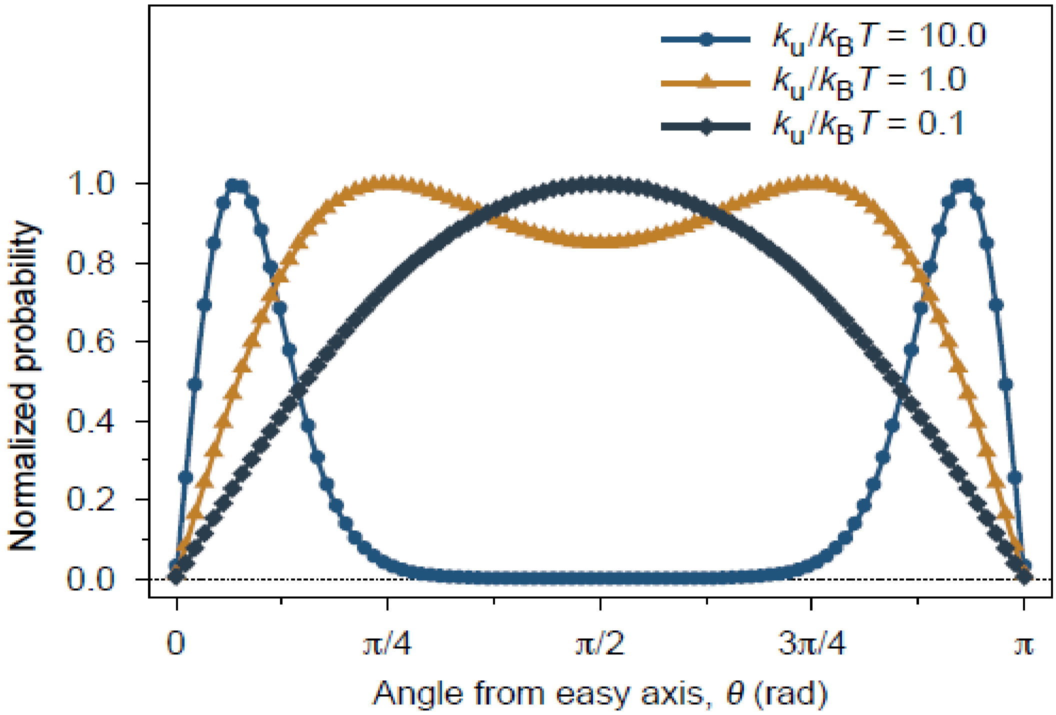
2.IV. توزيع Boltzmann لعزم منفرد:

للاختبار الكمي للخواص الحرارية في نموذج عشوائيةLLG أو طريقة Monte Carlo نستخدم أبسط الحالات ألا وهي حالة توزيع Boltzmann لعزم منفرد ذو تباين مناحي (أو بتطبيق حقل)، أين تكون درجات الحرارة وطاقة تباين المناحي خاضعتان للتوزيع الاحتمالي. يتم إعطاء توزيعBoltzmann[42] بواسطة:

$$P(\theta) \propto sin\theta exp\left(\frac{-k_{\mu}sin^2\theta}{k_BT}\right) (21-2)$$

θ:هي زاوية المحور السهل.

يكون العزم الابتدائي باتجاه المحور السهل للمغنطة، حيث يسمح النظام بتطور الاحتمال إلى غاية 10^8خطوة زمنية بعد الموازنة، في حين يتم تسجيل الزاوية بين العزم والمحور السهل في كل لحظة زمنية، وبما أن طاقة تباين المناحي متناظرة على طول المحور السهل، فإن التوزيع الاحتمالي حركته تقتصر فقط على$\theta < \pi/2$ في درجات الحرارة المنخفضة.إن الشكل (2-4) يبين التوزيع الاحتمالي الطبيعي لثلاث درجات حرارة منخفضة.



الشكل (2-4): *يمثل توزيع احتمالي زاوي محسوب لعزم منفرد ذو تباين مناحي لمختلف درجات الحرارة الفعالة k_u/K_BT.الخطوط توضح الحل النظري المعطى بواسطة المعادلة (2-21) [42].*

3.IV. درجة حرارة Curie:

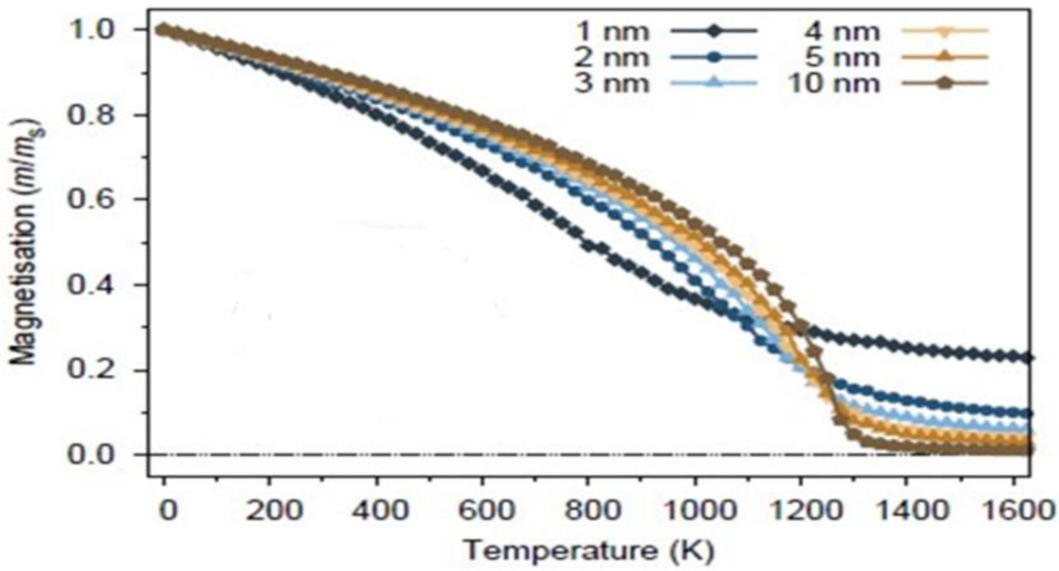
إن اختبارات هسترة Stoner-Wohlfarth وتوزيع Boltzmann مهمة للتحقق من إمكانية تنفيذ خوارزمية للعزم المنفرد، ولكن تفاعلات أنظمة العزم تمثل تحديًا كبيرًا لعدم وجود حلول نظرية للمقارنة معها، ومن ثم فمن الضروري حساب بعض الخصائص المجهرية المحددة بشكل جيد مما يضمن التنفيذ الصحيح للتفاعلات في النظام. من بين هذه الخصائص درجة حرارة Curie (T_c) للجسيمات المتناهية الصغر(نانوية)، التي تتحدد في المقام الأول من قوة تفاعل التبادل بين العزوم وهي تمثل اختبار مثالي لتعيين طاقة تفاعل التبادل. كما ذكرنا سابقا درجة حرارة Curie ترتبط بتأثير التبادل من خلال التعبير عن الحقل المتوسط المعطى في المعادلة (2-9)، ومع ذلك فبالنسبة للجسيمات النانوية ذات عدد الروابط المتناسق على السطح والعدد المحدود من العزوم فإن درجة حرارة Curie ودرجة الحرارة الحرجة التي تعتمد على المغنطة سوف تختلف اختلاف كبير باختلاف الحجم [59].

لدراسة التأثيرات المترتبة على الحجم المحدود وتقليل التنسيق السطحي على درجة حرارة Curie، تم حساب مغنطة التوازن لأحجام مختلفة. تعطى عبارة الهاميلتوني المعتمد في نظام المحاكاة بـ:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i\neq j} J_{ij}\vec{S}_i \,.\, \vec{S}_j \qquad (22-2)$$

حيث:$J_{ij} = 5.6 \times 10^{-21}\, J/link$والبنية البلورية مكعبة ممركزة الأوجه (من المفترض أن تكون تمثيلية للجسيمات النانوية للكوبالت Co). بالنظر إلى القوة النسبية لتفاعل التبادل، نجد أن تباين المناحي عموما لديه تأثير على درجة حرارة

Curie للمواد، وبالتالي فإن إهمال تباين المناحي من الهاميلتوني لأجل التبسيط فقط. تتم محاكاة النظام باستخدام طريقة Monte-Carlo.



الشكل(2-5): *يمثل تغير المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة، حيث يتم تعيين درجة حرارة Curie بالنسبة للجسيمات النانوية مع التغيير في الحجم [42].*

من المعادلة (2-9) درجة حرارة Curie المتوقعة هي 1282K، والتي تتوافق مع نتائج القطر 10nm للأجسام النانوية. حيث أنه بالنسبة لأحجام الجسيمات الصغيرة السلوك المغناطيسي القريب من درجة حرارة Curie يفقد حالته الحرجة، مما يجعل من تحديد T_c أصعب. تقليديا يتم أخذ نقطة Curie كحد أقصى للتدرج dm/dT [59]، ومع ذلك فإن هذه الدلالة تقلل من تقدير درجة الحرارة الفعلية التي يتم فيها فقدان النظام المغناطيسي (التي هي بواسطة التعريف درجة حرارة Curie)، لهذه النقطة تأثير آخر مثل التباعد في الحساسية الذي هو ربما أفضل تقدير للأنظمة المحدودة.

المراجع :

*[1]. E. Ising, Z.Phys. **31**(1925)253.*

*[2]. R. E. Watson, M. Blume, and G. H. Vineyard, Phys.Rev. **181**(1969)811.*

*[3]. K. Binder and H. Rauch, ZeitschriftfrPhysik**219**(1969)201.*

*[4]. R. Kodama and A. Berkowitz, Phys. Rev. B **59**(1999)6321.*

*[5]. C. Mitsumata, A. Sakuma, and K. Fukamichi, Phys. Rev. B **68**(2003)014437.*

[6]. U. Nowak, \Classical spin models," in Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials (John Wiley& Sons, Ltd, 2007).

*[7]. E. Boerner, O. Chubykalo-Fesenko, R. Chantrell, O. Heinonen, and O. Mryasov, IEEE Trans. Magn. **41**(2005)936.*

*[8]. B. Skubic, J. Hellsvik, L. Nordstrom, and O. Eriksson, J. Phys.: Condens. Matter**20**(2008)315203.*

*[9]. T. Ostler, R. F. L. Evans, R. W. Chantrell, U. Atxitia, O.Chubykalo-Fesenko, I. Radu, R. Abrudan, F. Radu, A. Tsukamoto, A. Itoh, A. Kirilyuk, T. Rasing, and A. Kimel, Phys. Rev. B **84**(2011).*

*[10]. T. A. Ostler, J. Barker, R. F. L. Evans, R. W. Chantrell, U. Atxitia, O. Chubykalo-Fesenko, S. El Moussaoui, L. Le Guyader, E. Mengotti, L. J. Heyderman, F. Nolting, A. Tsukamoto, A. Itoh, D. Afanasiev, B. A. Ivanov, A. M. Kalashnikova, K. Vahaplar, J. Mentink, A. Kirilyuk, T. Rasing, and A. V. Kimel, Nature Communications **3**(2012)666.*

*[11]. I. Radu, K. Vahaplar, C. Stamm, T. Kachel, N. Pontius, H. A. Durr, T. A. Ostler, J. Barker, R. F. L. Evans, R. W. Chantrell, A. Tsukamoto, A. Itoh, A. Kirilyuk, T. Rasing, and A. V. Kimel, Nature **472**(2011)205.*

*[12]. O. Iglesias, X. Batlle, and A. Labarta, Phys. Rev. B **72**(2005)212401.*

*[13]. R. F. L. Evans, D. Bate, R. W. Chantrell, R. Yanes, and O. Chubykalo-Fesenko, Phys. Rev. B **84**(2011)092404.*

*[14]. R. F. L. Evans, R. Yanes, O. Mryasov, R. W. Chantrell, and O. Chubykalo-Fesenko, EPL (Europhysics Letters) **88**(2009)57004.*

*[15]. M. Ali, C. H. Marrows, M. Al-Jawad, B. J. Hickey, A. Misra, U. Nowak, and K.-D. Usadel, Phys. Rev. B **68**(2003)214420.*

*[16]. D. Garanin and H. Kachkachi, Phys. Rev. Lett. **90**(2003)065504.*

*[17]. R. Yanes, O. Chubykalo-Fesenko, H. Kachkachi, D. Garanin, R. Evans, and R. Chantrell, Phys. Rev.B **76**(2007)064416.*

[18]. *P.-W. Ma, S. L. Dudarev, and C. H. Woo, J. Appl. Phys.* ***111****(2012)07D114.*

[19]. *R. Evans, U. Nowak, F. Dorfbauer, T. Shre, O. Mryasov, R. W. Chantrell, and G. Grochola, J. Appl. Phys.* ***99****(2006)08G703.*

[20]. *R. Evans, F. Dorfbauer, O. Myrasov, O. Chubykalo- Fesenko, T. Schre, and R. Chantrell, IEEE Tran. Magn.* ***43****(2007)3106.*

[21]. *P. Ho, R. F. L. Evans, R. W. Chantrell, G. Han, G.-M. Chow, and J. Chen, IEEE Trans. Magn****47****(2011)2646.*

[22]. *P. Chureemart, R. F. L. Evans, and R. W. Chantrell, Phys. Rev. B* ***83*** *(2011).*

[23]. *P. Asselin, R. F. L. Evans, J. Barker, R. W. Chantrell, R. Yanes, O. Chubykalo-Fesenko, D. Hinzke, and U. Nowak, Phys. Rev. B* ***82****(2010)054415.*

[24]. *J. Barker, R. F. L. Evans, R. W. Chantrell, D. Hinzke, and U. Nowak, Appl. Phys. Lett.* ***97****(2010)192504.*

[25]. *R. Yanes, O. Chubykalo-Fesenko, R. F. L. Evans, and R. W. Chantrell, J. Phys. D: Appl. Phys.* ***43****(2010)474009.*

[26]. *D. S. G. Bauer, P. Mavropoulos, S. Lounis, and S. Blugel, Journal of Physics: Condensed Matter* ***23****(2011)394204.*

[27]. *T. J. Fal, M. L. Plumer, J. P. Whitehead, J. I. Mercer, J. van Ek, and K. Srinivasan, Appl. Phys. Lett.* ***102****(2013)202404.*

[28]. *R. H. Victora and P.-W. Huang, IEEE Trans. Magn.* ***49****(2013)751.*

[29]. *O. Mryasov, U. Nowak, K. Guslienko, and R. W. Chantrell, EPL (Europhysics Letters)* ***69****(2005)805.*

[30]. *L. Szunyogh, L. Udvardi, J. Jackson, U. Nowak, and R. W. Chantrell, Phys. Rev. B* ***83****(2011).*

[31]. *L. Szunyogh, B. Lazarovits, L. Udvardi, J. Jackson, and U. Nowak, Phys. Rev. B* ***79****(2009).*

[32]. *L. M. Sandratskii and P. Mavropoulos, Phys. Rev. B* ***83****(2011)174408.*

[33]. *N. Kazantseva, D. Hinzke, U. Nowak, R. Chantrell, U. Atxitia, and O. Chubykalo-Fesenko, Phys. Rev. B* ***77****(2008)184428.*

[34]. *U. Atxitia, D. Hinzke, O. Chubykalo-Fesenko, U. Nowak, H. Kachkachi, O. Mryasov, R. F. L. Evans, and R. W. Chantrell, Phys. Rev. B* ***82****(2010)134440.*

[35]. *T. Jourdan, A. Marty, and F. Lancon, Phys. Rev. B* ***77****(2008)224428.*

[36]. *F. Garcia Sanchez, O. Chubykalo-Fesenko, O. Mryasov, and R. W. Chantrell, Physica B: Condensed Matter* ***372****(2006)328.*

[37]. *W. Scholz, J. Fidler, T. Schre, D. Suess, R. Dittrich, H. Forster, and V. Tsiantos, Computational Materials Science **28**(2003)366.*

[38]. *T. Fischbacher, M. Franchin, G. Bordignon, and H. Fangohr, IEEE Trans. Magn 43(2007)2896.*

[39]. *D. Jiles, Introduction to magnetism and magnetic materials (Chapman & Hall, London, UK, 1991).*

[40]. *R. Skomski, Simple Models of Magnetism (OUP Oxford,(2012).*

[41]. *P. Bruno, Physical Origins and Theoretical Models of Magnetic Anisotropy (Forschungszentrums Julich,1993).*

[42]. *R. F. L. Evans,W. J. Fan, P. Chureemart, T. A. Ostler, M. O. A. Ellis, and R. W. Chantrell, J,Phys.:Condens.Matter **26(2014)103202.***

[43]. *H. Danan, J. Appl. Phys. **39**(1968) 669.*

[44]. *D. A. Garanin, Phys. Rev. B **53**(1996)11593.*

[45]. *L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Phys. Z. Sowietunion**8**(1935)153*

[46]. *T. Gilbert, PhysicalReview**100**(1955)1243.*

[47]. *S. Karakurt, R. W. Chantrell, and U. Nowak, J. Magn. Magn.Mater.**316**(2007)280.*

[48]. *M. Fahnle, J. Seib, and C. Illg, Phys. Rev. B **82**(2010)144405.*

[49]. *A. Y. Dobin and R. H. Victora, Phys. Rev. Lett. **92**(2004)257204.*

[50]. *J. L. Garca-Palacios and F. J. Lazaro, Phys. Rev. B **58**(1998)14937.*

[51]. *D. Garanin, Phys. Rev. B 55(1997)3050.*

[52]. *M. Ellis, T. A. Ostler, and R. W. Chantrell, Phys. Rev. B **86**(2012)174418.*

[53]. *W. F. B. Jr., IEEE Trans. Mag. **15**(1979)1196.*

[54]. *A. Lyberatos, D. V. Berkov, and R. W. Chantrell, J. Phys: Condens. Matter**5**(1999)8911.*

[55]. *U. Nowak, O. Mryasov, R. Wieser, K. Guslienko, and R. Chantrell, Phys. Rev. B **72**(2005).*

[56]. *N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21**(1953)1087.*

[57]. *D. Hinzke and U. Nowak, Comput. Phys. Commun. **121**(1999)334.*

[58]. *E. C. Stoner and E. P. Wohlfarth, Philos. T. Roy. Soc. A **240**(1948)599.*

[59]. *O. Hovorka, S. Devos, Q. Coopman, W. J. Fan, C. J. Aas, R. F. L. Evans, X. Chen, G. Ju, and R. W. Chantrell, Appl. Phys. Lett. **101**(2012)052406.*

الفصل الثالث

مقدمة:

في هذا الفصل سنقوم بعرض نتائجنا المتحصل عليها وتحليلها ومناقشتها. حيث أن هذه النتائج تتمثل في رسم منحنى تغيرات المغنطة بدلالة درجة الحرارة بالنسبة للمعادن الانتقالية التالية: الغادولونيوم Gd، الحديد Fe، النيكل Ni والكوبالت Co. والذي سوف نستخرج منه درجة حرارة Curie لكل منهم. كما سنرسم المنحنى السابق مع التغيير في السمك لمعدن الـ Gd، وكذلك سنرى تصرف العزوم المغناطيسية على المستوى المجهري خلال درجات حرارة مختلفة. أيضا سنقوم بدراسة منحنى تغير تباين المناحي أحادي المحور والمكعبي لمختلف درجات الحرارة بدلالة الزاوية الكروية φ.

في هذا الفصل أيضا سنقدم دورات الهسترة (التخلف) للمعادن السابقة، مع رسم هذه الدورة بالنسبة للـGd بتغيير السمك وتعيين كل من H_s وH_c لكل سمك.وسندرس كذلك تغيرات المغنطة بدلالة درجة الحرارة لمركب الـ GdFe مع التغيير في نسبة الـ Gd في كل مرة وذلك من أجل الحصول على كل من درجة حرارة التعويض T_{comp} ودرجة حرارة Curie. مع التحليل والتفسير والمناقشة في كل مرة.

I.درجة حرارة Curie:

1.I.مفهومها:

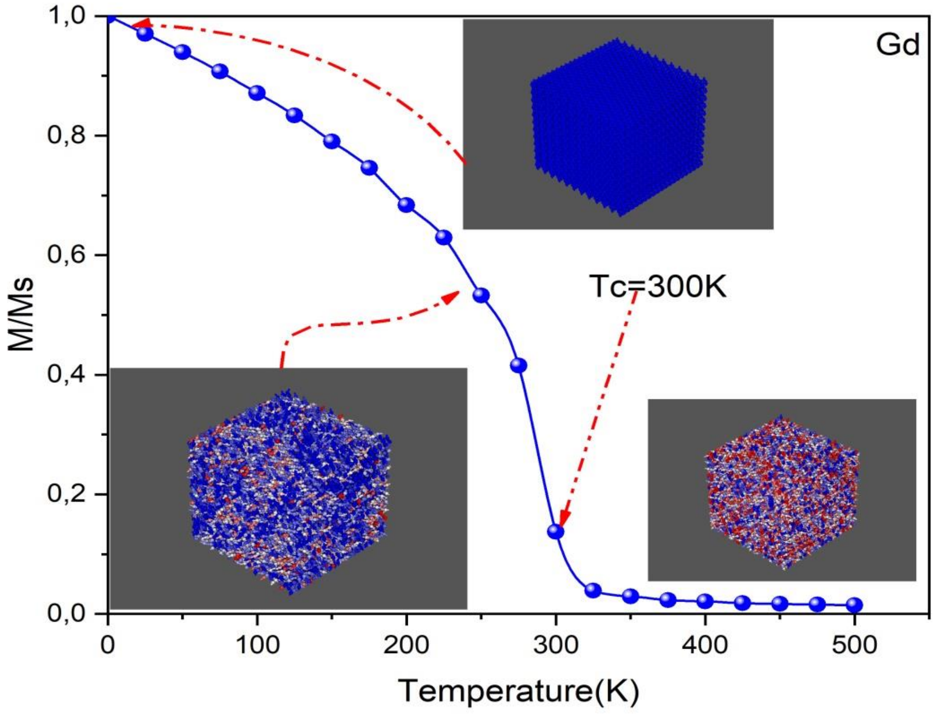
وهي خاصية مجهرية يمكننا تعيين قيمتها باستخدام محاكاة Monte-Carlo، وتحدد في المقام الأول من قوة تفاعل التبادل بين العزوم المغناطيسية. تمثل درجة حرارة Curie الحد الأقصى لتدرج المغنطة (إنعدام المغنطة).

يمكننا تحديد درجة حرارة Curie من خلال رسم منحنى تغيرات المغنطة النسبية M/Ms بدلالة درجة الحرارة T ($M/M_s = f(T)$).

برنامج POVRay يمكّننا من رؤية تصرف العزوم على المستوى المجهري.

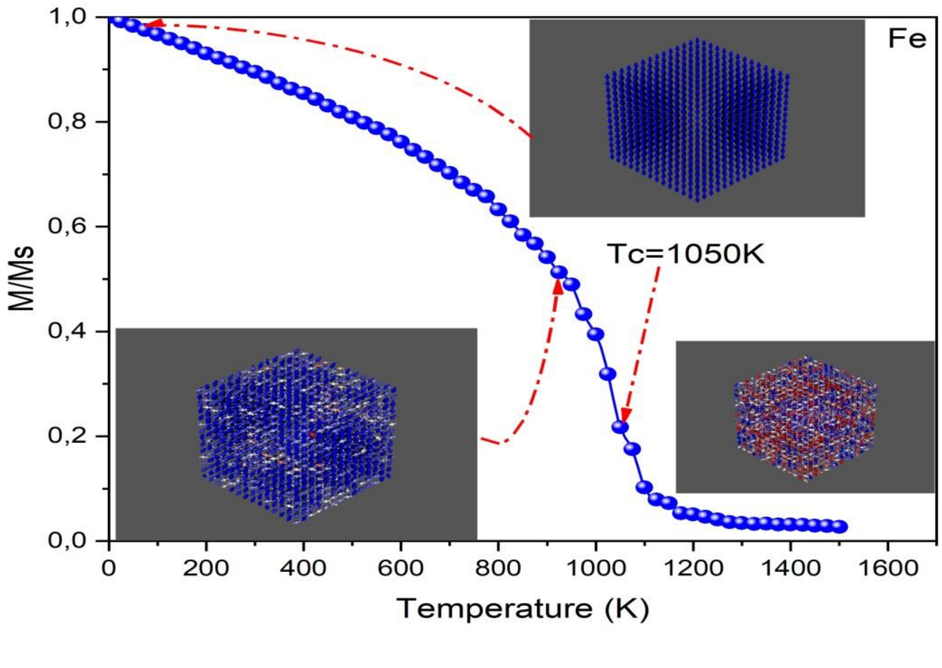
فيما يلي سنقدم نتائج قياسات درجة حرارة Curieالتي تحصلنا عليها باستخدام محاكاة Monte-Carlo وقمنا برسمها بواسطة برنامج Originللمعادن الإنتقالية التالية: Gd، Fe، Ni، Co حيث أخذنا 4nm كسمك لها.

الغادولونيومGd:



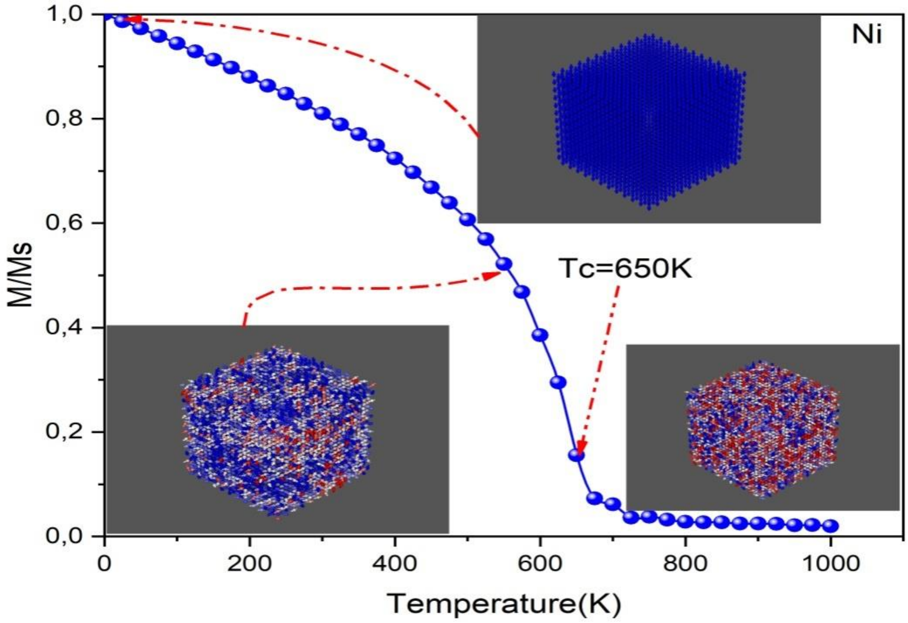
الشكل (1-3): *يمثل منحنى تغيرات المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة بالنسبة لـ Gd، والصور المرفقة توضح اتجاه العزوم.*

الحديد Fe:



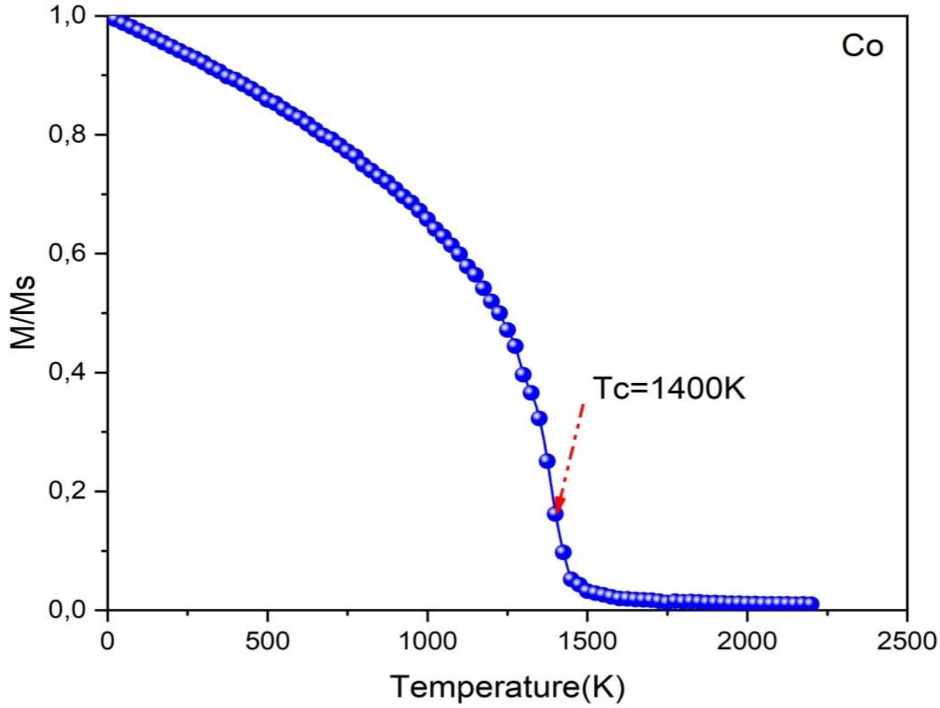
الشكل (2-3): *يمثل منحنى تغيرات المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة بالنسبة لـ Feوالصور المرفقة توضح اتجاه العزوم.*

النيكل Ni:



الشكل (3-3): *يمثل منحنى تغيرات المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة بالنسبة لـ Ni والصور المرفقة توضح اتجاه العزوم.*

الكوبالت Co:



الشكل (3-4): *يمثل منحنى تغيرات المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة بالنسبة لـ Co.*

I.2.تحليل منحنيات تغيرات المغنطة النسبيةM/Ms بدلالة درجة الحرارةT:

المنحنيات السابقة تمثل تغيرات المغنطة النسبيةM/Ms بدلالة درجة الحرارة T، حيث نلاحظ أن قيمة المغنطة النسبية تكون أعظمية عند درجة الحرارة المعدومة T=0K (M=Ms) وتستمر قيمة المغنطة بالتناقص مع زيادة درجة الحرارة إلى أن تنعدم عند نقطة معينة من درجة الحرارة والتي تمثل درجة حرارة Curie.

I.3.التفسير:

عند $T = 0K$: تكون المغنطة أعظمية مساوية للمغنطة التلقائية Ms، وهذا راجع إلى أن كل العزوم المغناطيسية منظمة لها نفس الاتجاه (كما هو موضح في الشكل حيث أن العزوم التي لها نفس الاتجاه لها نفس اللون).

عند $T < T_C$:نفسر تناقص المغنطة النسبية بزيادة العشوائية الراجعة لارتفاع درجات الحرارة.

زيادة العشوائية موضح بتغير اتجاه العزوم المبين في الصور المرافقة للمنحنيات بتغير لونها.

عند $T = T_C$: تنعدم المغنطة بسبب زيادة العشوائية (تغير اتجاه العزوم (تغير اللون)).

عند $T > T_C$: تستمر العشوائية في الزيادة، حيث أن هذه المواد المغناطيسية الحديدية (فيرومغناطيسية) تغير من طبيعتها وتصبح مواد مغناطيسية مسايرة (بارامغناطيسية).

I.4.النتائج:

- عند درجات الحرارة الأقل من درجة حرارة Curie، المواد تكون ذات طبيعة مغناطيسية حديدية (فيرومغناطيسية) أما بالنسبة لدرجات الحرارة الأكبر منها تكون هذه المواد ذات طبيعة مغناطيسية مسايرة (بارامغناطيسية).
- لكل مادة درجة حرارة Curieخاصة بها.
- المغنطة لم تنعدم بعد درجة حرارة Curie وذلك راجع للإرتباطات المغناطيسية للعزوم المحلية (مدى التأثير المغناطيسي) في الجسيمات النانوية لأن حجم النظام قريب من طول هذه الإرتباطات.

I.5.المقارنة بين القيم التجريبية والقيم المقاسة لدرجة حرارة Curie بالنسبة للمعادن الانتقالية:

المادة	Gd	Fe	Ni	Co
القيم التجريبية (K)	293	1043	631	1388
القيم المقاسة (K)	300	1050	650	1400

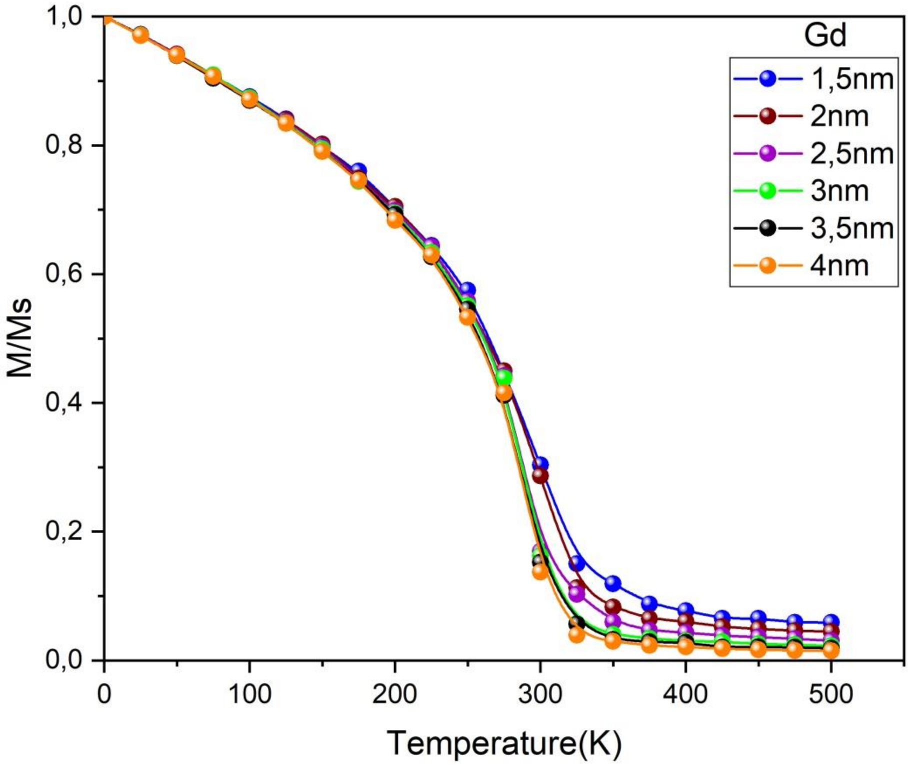
الجدول (1-3):*جدول للمقارنة بين قيم درجات حرارة Curie التجريبية والقيم المقاسة للمعادن الانتقالية التالية: Fe، Co، Ni وGd.*

نلاحظ أن القيم المقاسة موافقة للقيم التجريبية تقريبا ومنه يمكننا القول أن طريقة محاكاة Monte-Carlo طريقة قياسية ونتائجها صحيحة.

6.I.درجة حرارة Curie بالنسبة للغادولونيوم Gd مع تغيير السمك:

أخذنا عينة من معدن الغادولونيوم وقمنا بالتغيير في سمكها من 1.5nm إلى 4nm وبخطوة قدرها 0.5nm، وقمنا برسم منحنى المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة بالنسبة لكل سمك، وهذا لتعيين درجة حرارة Curie ولمعرفة مدى تأثير السمك عليها.

1.6.I. المنحنى:



الشكل (3-5): *يمثل منحنى تغيرات المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة بالنسبة لـGd مع التغيير في السمك.*

2.6.I. التحليل:

المنحنى يمثل تغيرات المغنطة النسبية M/Ms بدلالة درجة الحرارة T بالنسبة للغادولونيوم Gd مع التغيير في سمك العينة (1.5nm-4nm)، حيث نلاحظ أن المغنطة تكون أعظمية $(M = M_S)$ لكل سمك عند درجة الحرارة T=0K وتستمر قيمة المغنطة بالتناقص مع زيادة درجة الحرارة إلى أن تنعدم عند نقطة معينة منها والتي تمثل درجة حرارةCurie.

نلاحظ أن درجة حرارة Curieليست متوافقة بالنسبة لكل الأبعاد من 1.5nm إلى 4nm.

3.6.I. التفسير:

نفسر عدم توافق درجة حرارة Curie بالنسبة لكل سمك أنه بالنسبة لأحجام الجسيمات الصغيرة السلوك المغناطيسي القريب من درجة حرارة Curie يفقد حالته الحرجة، مما يجعل من تحديد T_C أصعب.

4.6.I. النتيجة:

- درجة حرارة Curie تختلف باختلاف السمك.
- كلما كان سمك العينة كبير، كلما كان منحنى المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة أسرع إلى الإنعدام،وهذا بالنسبة لدرجات الحرارة بعد درجة حرارة Curie.
- يلعب تأثير الحجم المحدود دور في تزايد الخصائص الفيزيائية للأنظمة المغناطيسية.

II. تباين المناحي:

1.II.مفهومه:

تباين المناحي هو طاقة حرة ويعتبر خاصية مغناطيسية للمادة يتعلق بدرجة حرارة التوازن، ويمكن حسابه من خلال استخدام خوارزمية Monte-Carlo القسرية أين يكون اتجاه المغنطة ثابت ومقيد. ينتج تباين المناحي عن التفاعل عزم-مدار.

لقد كان تباين المناحي المغناطيسي المعتمد على درجة الحرارة للمغناطيسات الحديدية النقية معروفًا على مدار عقود، وفقًا لنظرية Callen-Callen [1]، ومن الأمثلة على هذه المواد النقية Gd (تباين مناحي أحادي المحور) وFe (مكعبي). تتمتع المواد المغناطيسية الحديدية الأخرى مثلCo بتباين مناحي متعلق بدرجة حرارة أكثر تعقيدًا الراجع إلى الأصل البلوري [2]. في الواقع، مع ارتفاع درجة الحرارة، يظهر تباين المناحي بالنسبة للـCo تغييراً في الإشارة، مما يشير إلى التحول من محور سهل إلى مستوي تباين مناحي سهل. بشكل عام، لا يعتبر تباين المناحي المعتمد على درجة الحرارة واضحًا في العديد من المواد، وبالتالي لا يزال مجال البحث واسعا حتى بعد 40 عامًا تقريبًا من نظرية Callen-Callen.

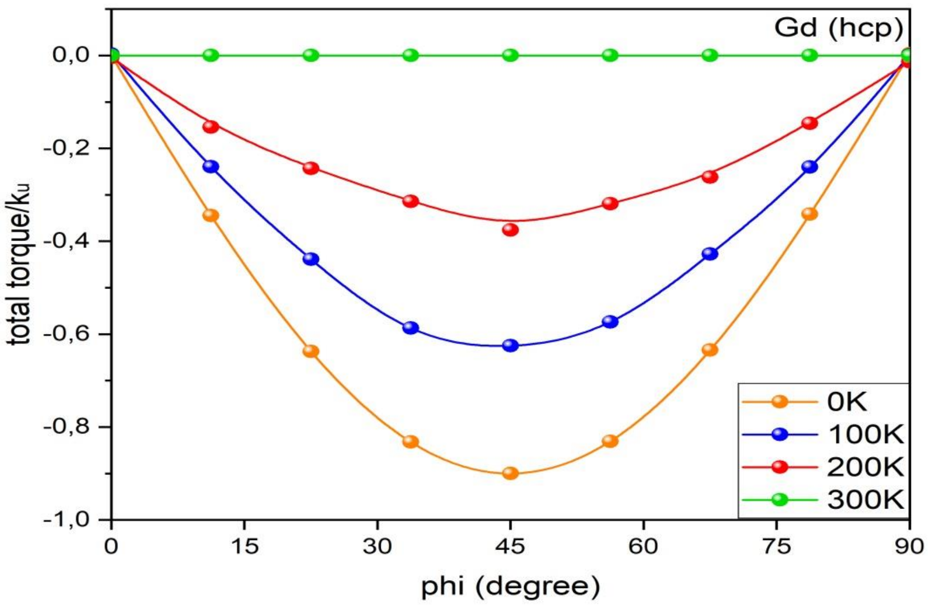
في الآونة الأخيرة، أصبح سلوك تباين المناحي المغناطيسي المتعلق بدرجة الحرارة المرتفعة مهمًا بسبب تطبيقاته في التسجيل المغناطيسي بواسطة الحرارة [3-5].

في العمل الحالي، تم تقريب مثل هذه النظم الكبيرة عن طريق محاكاة نظام مغناطيسي حديدي عام عزومه اللحظية متعددة ذات ظروف حدية دورية، وذلك للقضاء على التأثيرات السطحية والتقليل من آثار الحجم المحدود.

سنقدم الآن منحنيات تباين المناحي التي قمنا برسمها بواسطة برنامج Origin للمعادن الانتقالية التالية:Gd، Fe، Co حيث أخذنا 4nm كسمك لها.

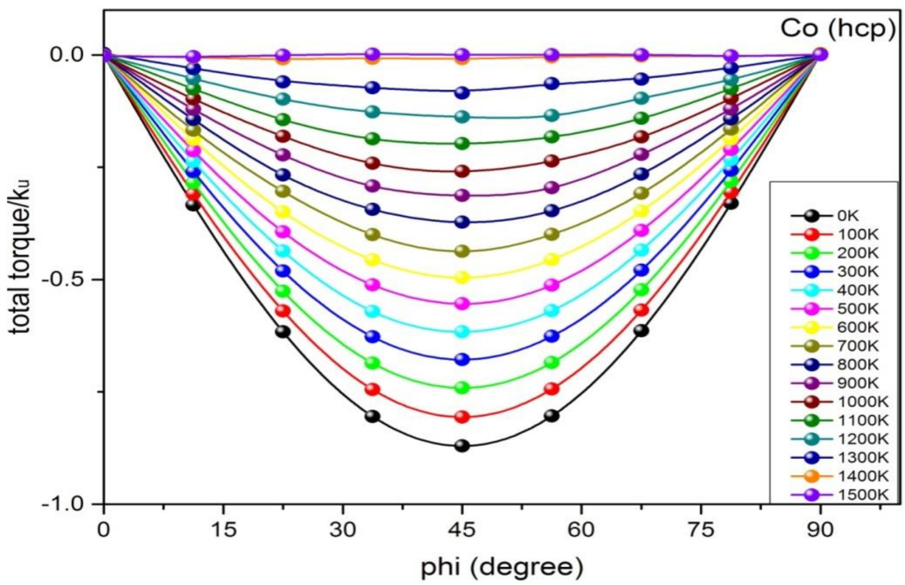
II.2. منحنيات تباين المناحي أحادي المحور حيث $\varphi \in [0, 90°]$:

الغادولونيوم Gd:



__الشكل(3-6):__ يمثل تغيرات العزم المزدوج بدلالة الزاوية الكروية φ لمختلف درجات الحرارة بالنسبة لـ Gd.

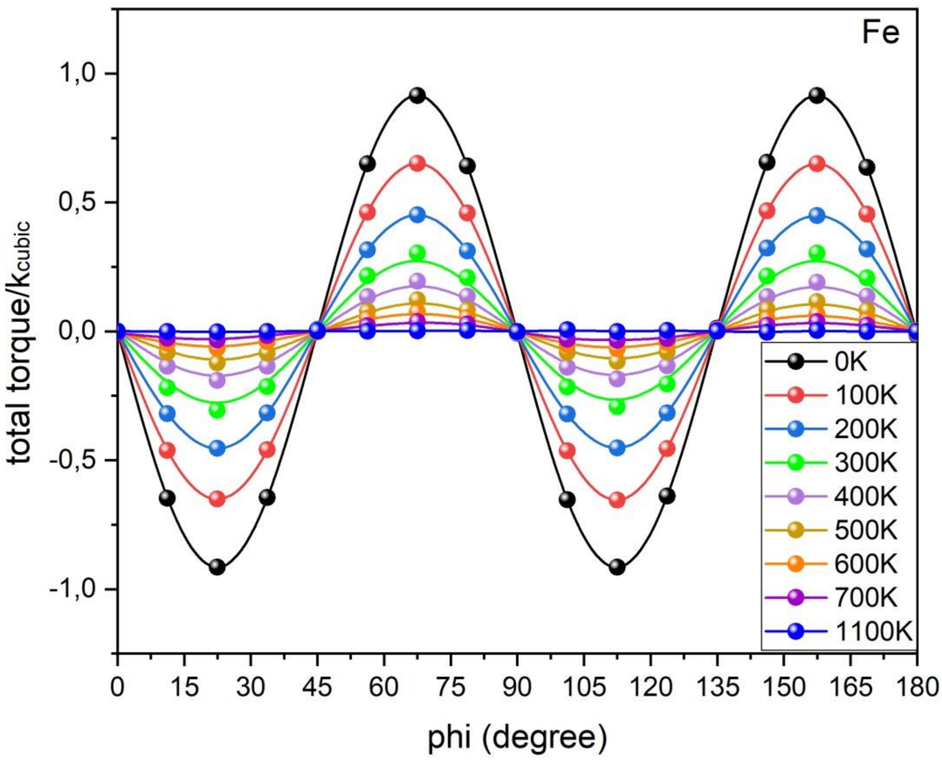
الكوبالت Co:



__الشكل(3-7):__ يمثل تغيرات العزم المزدوج بدلالة الزاوية الكروية φ لمختلف درجات الحرارة بالنسبة لـ Co.

3.II.منحنيات تباين المناحي المكعبي حيث $\varphi \in [0, 180°]$:

الحديد Fe:



***الشكل(3-8):**يمثل تغيرات العزم المزدوج بدلالة الزاوية الكروية φ لمختلف درجات الحرارة بالنسبة لـ Fe.*

4.II.تحليل المنحنيات الخاصة بتباين المناحي أحادي المحور:

- $\varphi \in [0, 90°]$**:**المنحنيات السابقة تمثل تغيرات العزم المزدوج بدلالة الزاوية الكروية، حيث نلاحظ أن تباين المناحي يتناقص في المجال $\varphi < 45°$، ويزداد في المجال $45° \leq \varphi \leq 90°$.

نلاحظ أنه كلما زادت درجة الحرارة تتناقص قيم تباين المناحي إلى أن تنعدم عند درجة حرارة Curie (النقاط توضح العزم المزدوج المحسوب).

5.II. تحليل المنحنيات الخاصة بتباين المناحي المكعبي:

المنحنى السابق يمثل تغيرات العزم المزدوج بدلالة الزاوية الكروية، حيث نلاحظ أن هذا التغير جيبي يتناسب مع العلاقة الخطية$\sin(2\varphi)$.يتناقص تباين المناحي في المجال $\varphi < 22.5°$،ويزداد في المجال$22.5° \leq \varphi \leq 67.5°$، ثم تتناقص في المجال $67.5° \leq \varphi \leq 90°$، وتتكرر نفس التغيرات السابقة في المجال $90° \leq \varphi \leq 180°$.

كلما زادت درجة الحرارة تتناقص قيم تباين المناحي إلى أن تنعدم عند درجة حرارة Curie.

6.II.التفسير:

تناقص تباين المناحي بزيادة درجة الحرارة إلى أن ينعدم عند درجة حرارة Curie راجع إلى أن العزم المزدوج في هذه الأنظمة ينحرف عن سلوك $sin(2\varphi)$المتوقع. وهذا ما يبين أنه في درجات الحرارة العالية تقلبات المغنطة القوية تؤثر على سلوك الطاقة الحرة.

7.II. النتائج:

- كلما زادت درجة الحرارة يتناقص تباين المناحي إلى انعدامه عند T_C.
- تباين المناحي يتناقص/يزداد في الاتجاه الصعب/السهل.
- تباين المناحي المكعبي يقتصر فقط على $\pi/_2$ نتيجة لوجود التناظر.
- تباين المناحي المكعبي أضعف بكثير من تباين المناحي أحادي المحور لأنه لديه ثلاث محاور أساسية للمغنطة.

III.حلقة الهسترة:

1.III.مفهومها:

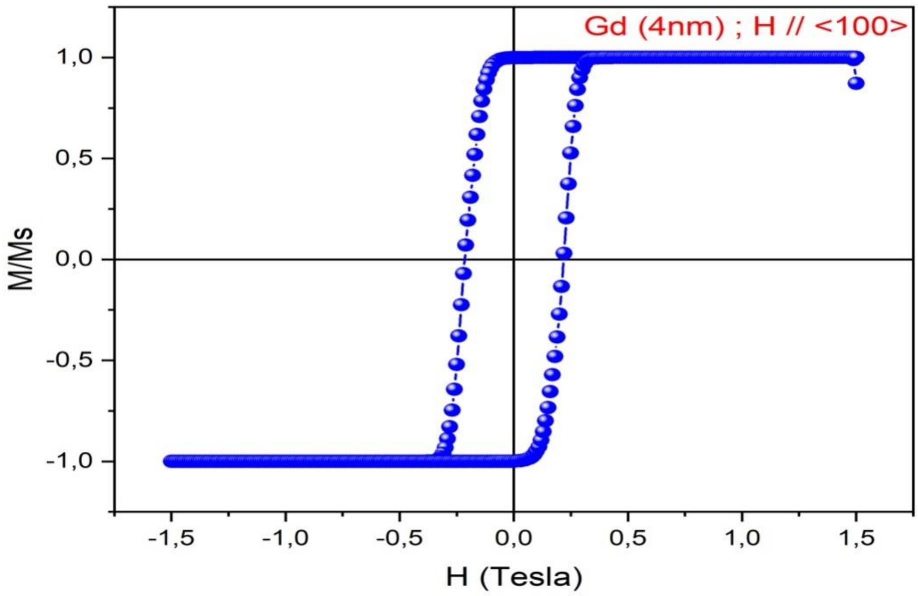
دورة الهسترة هي إحدى الطرق التجريبية القياسية التي تصف لنا بعض الخواص المغناطيسية مثل: الحقل القسري H_c، حقل التشبع H_s، مغنطة التشبع M_s، المغنطة المتبقية M_r....

وهي أحد الخصائص المميزة للمواد المغناطيسية حيث أن برنامج المحاكاة المستخدم يقوم برسمها لأي مركب وبدقة متناهية.

نحن الآن بصدد تقديم منحنيات حلقة الهسترة التي قمنا برسمها بواسطة برنامج Origin للمعادن الانتقالية التالية:Gd، Fe، Ni.

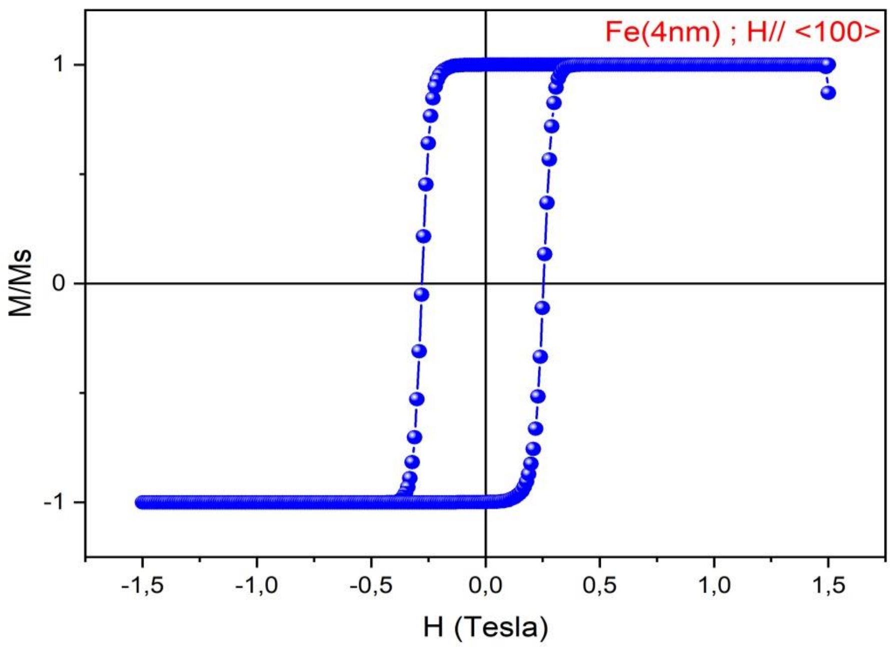
III.2. منحنيات حلقة الهسترة:

الغادولونيوم Gd:



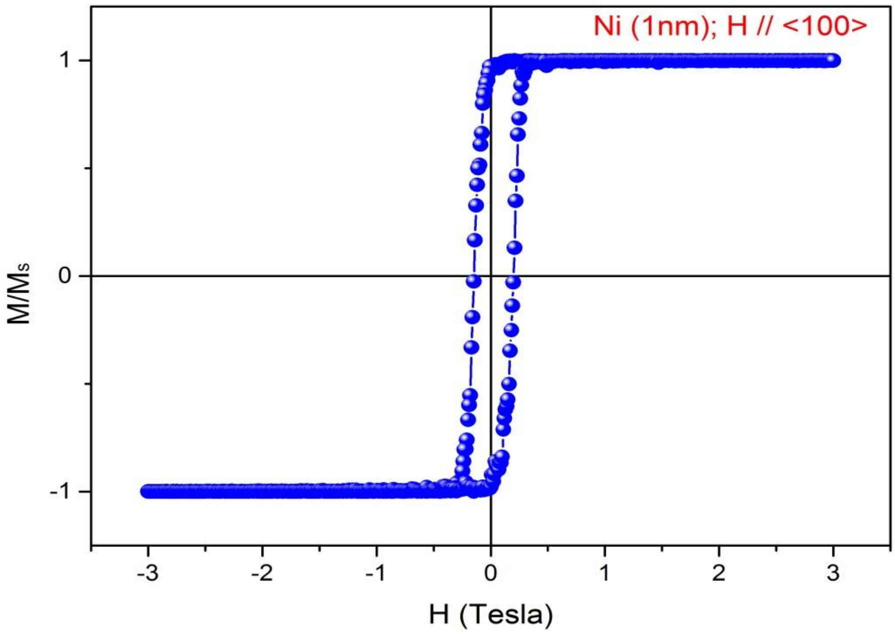
الشكل(3-9): *يمثل تغيرات المغنطة النسبية بدلالة الحقل المطبق H_{app} بالنسبة لـ Gd.*

الحديد Fe:

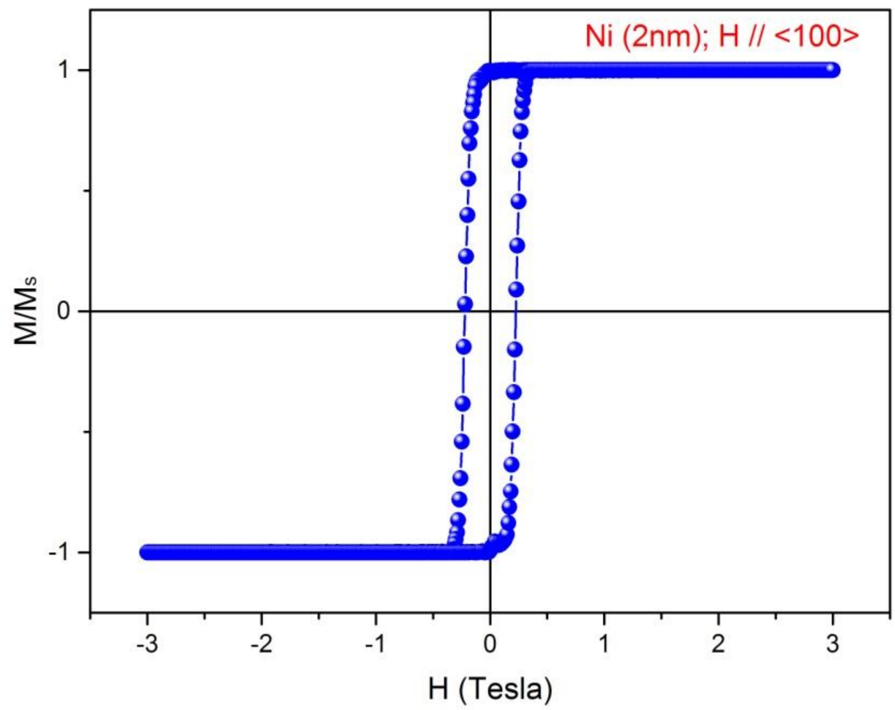


الشكل(3-10): *يمثل تغيرات المغنطة النسبية بدلالة الحقل المطبق H_{app} بالنسبة لـ Gd.*

النيكل Ni:



***الشكل(11-3):** يمثل تغيرات المغنطة النسبية بدلالة الحقل المطبق H_{app} بالنسبة لـNi حيث يكون السمك 1nm.*



***الشكل(12-3):** يمثل تغيرات المغنطة النسبية بدلالة الحقل المطبق H_{app} بالنسبة لـNi حيث يكون السمك 2nm.*

3.III.تحليل منحنيات:

المنحنيات تمثل تغيرات المغنطة النسبية بدلالة الحقل المطبق.

أخذنا عينة مغناطيسية حديدية (فيرومغناطيسية)، قمنا بتطبيق حقل مغناطيسي عليها فازدادت قيمة المغنطة بعد أن كانت منعدمة حتى بلغت قيمة مغنطة التشبع M_s عند حقل التشبع H_s.مهما تزايدت قيمة الحقل المطبق بعد ذلك فإن المغنطة لا تتجاوز قيمة مغنطة التشبع.

نلاحظ أنه عند التقليل من الحقل المطبق تتناقص المغنطة ولا تنعدم رغم إنعدام الحقل بل تأخذ قيمة معينة والتي تسمى بالمغنطة المتبقية M_r،و تنعدم هذه المغنطة إلا عند تطبيقنا لحقل مغناطيسي في الاتجاه السالب عند القيمة H_c-وعند زيادة قيمة الحقل المطبق في الاتجاه السالب تصل المادة ثانية إلى مرحلة التشبع العكسيةM_s- عند قيمة حقل التشبع العكسي H_s-.

عند الزيادة ثانية في الحقل المطبق تزداد المغنطة إلى أن تصل الى قيمة المغنطة المتبقية العكسية M_r-، والتي تكون مناظرة لقيمة M_r وتبقى المغنطة في زيادة إلى أن ترجع إلى مغنطة التشبع وبهذا تتشكل دورة الهسترة.

4.III. التفسير:

تحتوي العينة في المستوى المجهري على نطاقات Weiss وجدران تسمى جدران Bloch، حيث أن العزوم تتموضع بشكل منتظم في كل مجال ويختلف اتجاهها من مجال إلى آخر.

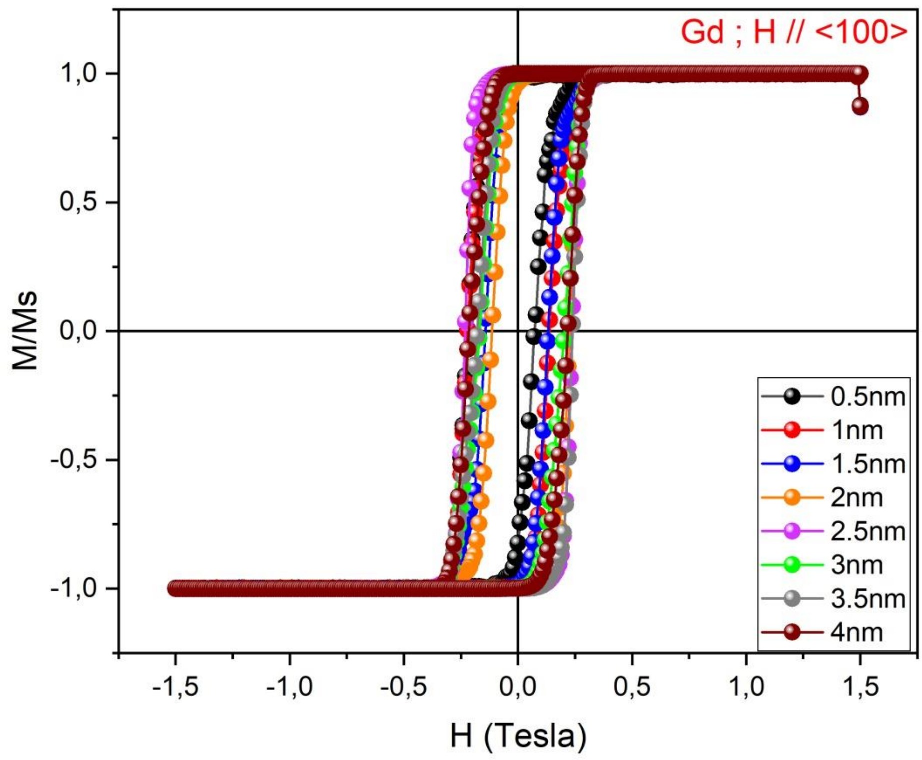
عند تطبيق الحقل المغناطيسي تبدأ جدران Bloch بالانزياح تدريجيا إلى أن تختفي، مما يؤدي إلى تغيير تقسيم المجالات ومنه يتغير اتجاه العزوم لكي يأخذ اتجاه الحقل المطبق، وهذا ما يفسر الزيادة في المغنطة حتى التشبع.

تناقص قيم المغنطة عند التقليل من الحقل المطبق راجع إلى إعادة تشكل جدران Bloch، وهذه الأخيرة لم تتشكل بنفس الكيفية الأساسية مما يفسر عدم انعدام المغنطة رغم زوال التأثير الخارجي لأن المادة تحتفظ بجزء من مغنطتها المكتسبة.

وبالإستمرار في تناقص الحقل المطبق تعود عزوم المادة إلى العشوائية بسبب وجود قوى داخلية تعيق دوران العزوم.

وصول المادة إلى حالة التشبع العكسية دليل على أن اتجاه كل العزوم أصبح معاكسا لما كان عليه (عكس اتجاه الحقل المطبق) ويعني هذا زوال جدرانBloch.

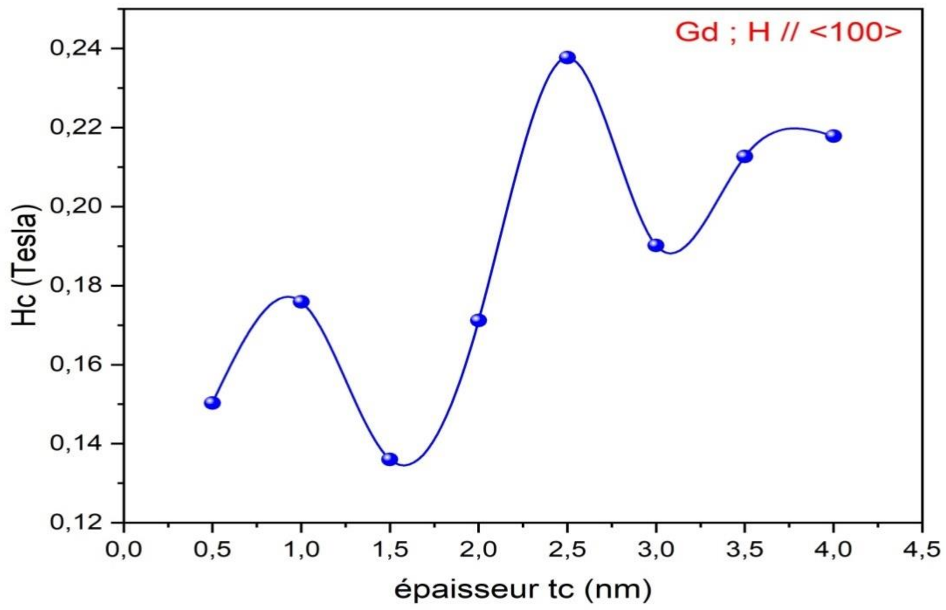
5.III.منحنى دورة الهسترة بدلالة السمك:



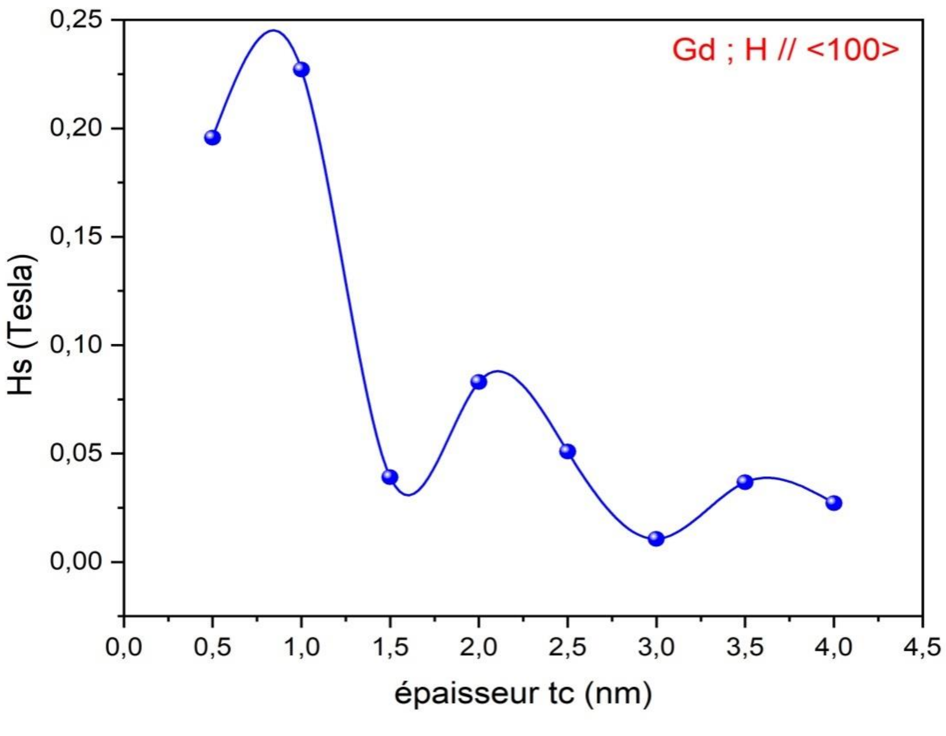
***الشكل(3-13):**يمثل تغيرات المغنطة النسبية بدلالة الحقل المطبقH_{app} بالنسبة لـGd مع التغيير في السمك.*

1.5.III.التحليل:

المنحنى يمثل تغيرات المغنطة النسبية بدلالة الحقل المطبقH_{app}بالنسبة لـ Gd مع التغيير في السمك، وبرسمنا لهذه الدوارات ومن خلال القياسات، قمنا برسم منحنيي تغير الحقل القسري وحقل التشبع بدلالة سمك العينة:



<u>الشكل (3-14):</u> *يمثل تغيرات الحقل القسري H_c بدلالة سمك العينة t_c بالنسبة لـ Gd.*



<u>الشكل (3-15):</u> *يمثل تغيرات حقل التشبع H_s بدلالة سمك العينة t_c بالنسبة لـ Gd.*

نلاحظ أن كل من H_c و H_s يتغيران بتغير سمك العينة بطريقة اهتزازية.

2.5.III.التفسير:

نفسر هذا الاهتزاز الملاحظ بوجود التأثير المتبادل بين الذرات.

الزيادة في قيم الحقل القسري الملاحظة في الشكل (3-14) راجعة إلى أنه مرتبط بسمك النطاق المغناطيسي، حيث أنه كلما زاد السمك تزداد قيمة H_c.

نفسر تناقص قيم حقل التشبع بأنه مرتبط بتفاعل التأثير المتبادل الذي يشبه إلى حد كبير النموذج النظري لـ RKKY(Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida)، حيث أنه كلما زاد سمك العينة يزداد البعد البلوري وبالتالي يتناقص تفاعل التبادل.

6.III.النتائج:

- لكل مادة دورة هسترة خاصة بها.
- تختلف مساحة دورة الهسترة باختلاف السمك وأيضا التباين المغناطيسي.
- H_c مرتبط بسمك النطاق المغناطيسي.
- H_s يتعلق بتفاعل التأثير المتبادلRKKY.

المراجع:

*[1]. H. B. Callen and E. Callen, J. Phys. Chem. Solids.**27**(1966)1271.*

*[2]. P. Bruno, Phys.Rev.B.**39**(1989)865.*

*[3]. H. F. Hamann, Y. C. Martin, and H. K. Wickramasinghe.**84**(2004)810.*

*[4]. R. E. Rottmayer, S. Batra, D. Buechel, W. A. Challener, J.Hohlfeld, Y.Kubota, L. Lei, L. Bin, C. Mihalcea, K. Mountfield,K. Pelhos, P.Chubing, T. Rausch, M. A. Seigler, D. Weller, andY. XiaoMin, IEEE Trans. Magn. **42**(2006)2417.*

*[5]. T. W. McDaniel, J. Phys.: Condens. Matter.**17**(2005)315.*

الخاتمة العامة

تقدم النمذجة الذرّية للمواد المغناطيسية تفاصيل حول العناصر الأساسية والعمليات الفيزيائية التي تتحكم في الخصائص العيانية.والمحاكاة هي إحدى الطرق المستخدمة في هذه النمذجة،وتسمح هذه الأخيرة بمحاكاة معقدة مثل تباين مناحي السطح، ديناميكيات العزم المستحث بالليزر فائق السرعة، exchange bias، البنية الدقيقة....

خلال هذا العمل، قمنا بتطبيق طريقة Monte-Carloعلى المعادن الانتقالية التالية: الحديد (Fe)، الكوبالت (Co)، النيكل (Ni) والغادولونيوم (Gd).والهدف من ذلك هو معرفة وتحديد بعض الخواص المغناطيسية عن طريق استخدام برنامج محاكاةMonte-Carlo، والذي بدوره يعطينا مجموعة من النتائج المقدمة في شكل ملفOutput،وبواسطة هذه النتائج يمكننا تحديد هذه الخواص التي منها: درجة حرارة Curie(T_c). حيث قمنا بتحليل وشرح النتائج مع رسم منحنى تغيرات المغنطة النسبية بدلالة درجة الحرارة T. ومن خلاله حددنا T_cلكل معدن:$T_c(Fe) = 1050K$، $T_c(Co) = 1400K$،$T_c(Ni) = 650K$ و$T_c(Gd) = 300K$والتي كانت موافقة للقيم التجريبية. بزيادة درجات الحرارة تزداد العشوائية في النظام فتصبح المادة ذات طبيعة مغناطيسية مسايرة (بارامغناطيسية) بعد أن كانت ذات طبيعة مغناطيسية حديدية (فيرومغناطيسية) وذلك لأن محصلة اتجاه العزوم أصبحت معدومة عند T_c. ولمعرفة تأثير السمك على هذه الخاصية (درجة حرارة Curie) قمنا برسم نفس المنحنى السابق مع التغيير في سمك العينة وفعلا وجدنا أن للسمك تأثير عليها. كما أننا تمكنّا من رؤية تصرف العزوم على المستوى المجهري باستخدام برنامج POVRay. إن طريقة Monte-Carloالقصرية تمكننا كذلك بعد اتباع الخطوات المذكورة سابقا من رسم منحنى يبين تغيرات تباين المناحي بدلالة زاوية الحقل المطبق وتأثير درجة الحرارة عليها، حيث أن هناك نوعين من تباين المناحي:تباين المناحي أحادي المحور وتباين المناحي المكعبي الذي يتناسب مع العلاقة الخطية($\sin(2\varphi)$، وهو يقتصر فقط على $^{\pi}/_{2}$وذلك بسبب التناظر. عند زيادة درجة الحرارة تتناقص طاقة تباين المناحي إلى أن تنعدم عند T_C.

يمكننا رسم دورة الهسترة لأي مركب كان وبدقة متناهية بواسطة طريقة Monte-Carloحيث أننا قمنا برسمها بالنسبة للمعادن المدروسة،وكذلك رسم دورة الهسترة بالتغيير في الأبعاد والتي من خلالها قمنا بتحديد كل من تغيرات حقل التشبع H_s والحقل القسري H_cفي كل مرة بالنسبة لكل دورة خاصة بسمك معين وقمنا برسمهم بدلالة السمك t_c وهذا بالنسبة للغادولونيوم (Gd)، حيث أن H_cمرتبط بسمك النطاق المغناطيسي أما H_sفهو مرتبط بتفاعلالتأثير المتبادل، ونلاحظ أن H_cيزداد أما H_s فهو يتناقص بزيادة السمك.

ولقد طبقنا أيضا المحاكاة باستخدام طريقة Monte-Carloعلى المركب GdFe لأجل دراسة تغيرات درجة حرارة Curieودرجة حرارة التعويضT_{Comp}، بحيث قمنا بدمج كل من الحديد والغادولونيوم بنسب مختلفة فتوصلنا إلى نتيجة تفيد بأن هاتين الخاصيتين تتعلقان بطبيعة ونسب مواد المركب.

توافق قياساتنا مع التجربة يدل على أن المحاكاة هي نمذجة قياسية وتعتبر طريقة مثلى للتعرف على العديد من الخصائص،وهذا راجع لصعوبة التجريب ولصعوبة تحقيق كل الشروط اللازمة في المجال التطبيقي. مازالت الأبحاث في تواصل ولم تنته لأننا نعتقد أنه من الضروري تحسين النتائج أكثر.