

Magnetisme

Senave Alex BN3

Inwendige Bouw van de Vaste Stof

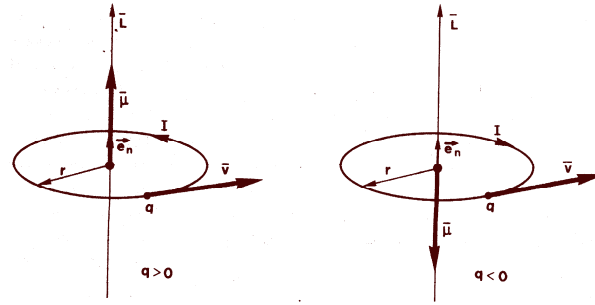
| | | |
|-----------|--|----------|
| I | Magnetisch moment | 2 |
| II | De verschillende types magnetisme | 6 |
| 1. | Inleiding | 6 |
| 2. | Diamagnetisme | 7 |
| 2.1. | Larmor diamagnetisme | 7 |
| 2.2. | Landau diamagnetisme | 11 |
| 3. | Paramagnetisme | 12 |
| 3.1. | Langevin paramagnetisme - de Brillouin functie | 12 |
| 3.2. | Pauli paramagnetisme | 17 |
| 4. | Ferromagnetisme | 19 |
| 4.1. | Algemeen | 19 |
| 4.2. | De ferromagnetische Curietemperatuur | 20 |
| 4.3. | Anisotropie energie | 25 |
| 4.4. | Magnetische domeinen | 28 |
| 4.4.1. | Het fenomeen | 28 |
| 4.4.2. | Uitwisselingsenergie | 29 |
| 4.4.3. | Demagnetisatie energie | 31 |
| 4.4.4. | Néel wand | 33 |
| 4.4.5. | Magnetische domeinbellen | 34 |
| 4.5. | Magnetische hysteresis | 35 |
| 5. | Ferrimagnetisme | 38 |
| 5.1. | Algemeen | 38 |
| 5.2. | De ferrimagnetische susceptibiliteit en Curietemperatuur | 41 |
| 6. | Antiferromagnetisme | 44 |
| 6.1. | Algemeen | 44 |
| 6.2. | De antiferromagnetische susceptibiliteit en de Néeltemperatuur | 46 |
| 6.3. | Antiferromagnetische domeinen | 49 |

| | |
|--|-----------|
| III Experimentele technieken | 50 |
| 1. Neutronen diffractie | 50 |
| 1.1. Inleiding..... | 50 |
| 1.2. Het diffractiespectrum..... | 52 |
| 1.2.1. Nucleaire verstrooiing | 52 |
| 1.2.2. Magnetische verstrooiing | 52 |
| 1.2.3. Opbouw van het spectrum | 53 |
| 1.3. Enkele resultaten..... | 56 |
| 1.3.1. Mangaandifluoride | 56 |
| 1.3.2. Mangaanoxide | 59 |
| 2. Muon spin rotatie..... | 60 |
| 2.1. Principe | 60 |
| 2.2. Het spectrum | 62 |
| 2.3. Toepassing..... | 65 |
| 2.3.1. Inleiding | 65 |
| 2.3.2. Voorbeeld: nikkel..... | 67 |
| IV Enkele toepassingen | 69 |
| 1. Harde en zachte ferromagneten..... | 69 |
| 2. Hard Disk..... | 72 |
| 2.1. Opbouw | 72 |
| 2.2. Werking | 75 |
| 2.2.1. Data opslag | 75 |
| 2.2.2. Magnetic Force Microscopy: MFM | 76 |
| 2.3. De lees/schrijfkoppen | 77 |
| 2.3.1. Ferriet koppen..... | 78 |
| 2.3.2. 'Metal in Gap' koppen (MIG) | 78 |
| 2.3.3. Dunne film koppen (TF) | 79 |
| 2.3.4. Magnetoresistieve koppen (MR)..... | 79 |
| 2.3.5. 'Giant Magnetoresistive' koppen (GMR) | 80 |

Hoofdstuk I

Magnetisch moment

Volgens het semi-klassiek *model van Bohr* beschrijven alle elektronen cirkelvormige banen rond de kern.



We kunnen dus een equivalente stroom vooropstellen met grootte

$$I = qv$$

waardoor het magnetisch dipoolmoment gegeven wordt door

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu} &= I\pi r^2 \mathbf{e}_n = qv\pi r^2 \mathbf{e}_n \\ &= q \frac{v}{2\pi r} \pi r^2 \mathbf{e}_n = \frac{qvr}{2} \mathbf{e}_n\end{aligned}$$

Rekening houdend met de definitie van het impulsmoment voor een dergelijke situatie:

$$\mathbf{L} = mvr\mathbf{e}_n$$

hebben we dus

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \mathbf{L} = g_l \mathbf{L}$$

met g_l de *gyromagnetische verhouding*. Maken we gebruik van de kwantummechanische uitdrukking voor de grootte van het *baanimpulsmoment*:

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

dan volgt hieruit dat de grootte van het orbitaal magnetisch moment gegeven wordt door

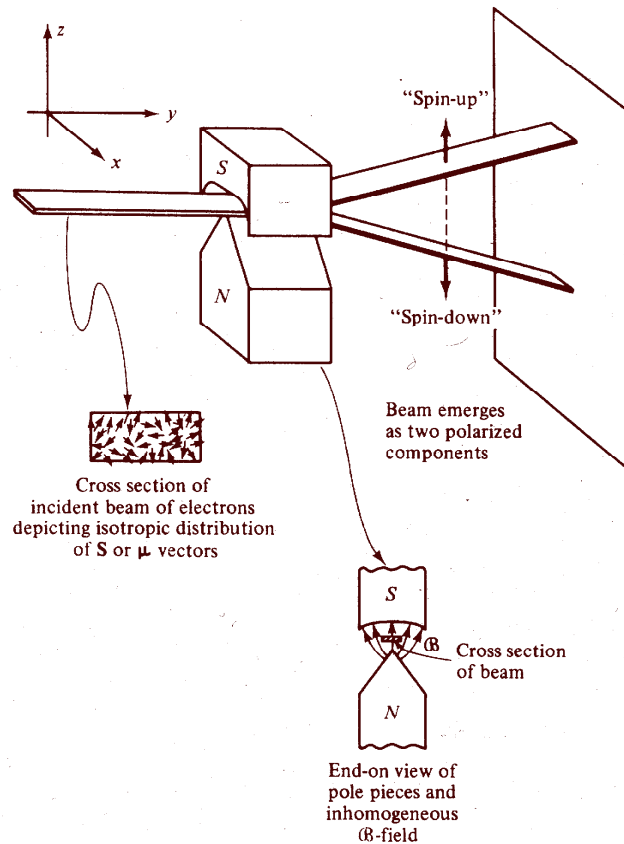
$$\mu_L = -\frac{e}{2m_e} \hbar \sqrt{l(l+1)} = g_l \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

en de mogelijke projecties op de voorkeursrichting (z -as)

$$\mu_{L,z} = -\frac{e}{2m_e} m_l \hbar = g_l \mu_B m_l$$

met $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$

Uit het Stern-Gerlach experiment (verklaard door Goudsmit en Uhlenbeck) is gebleken dat het elektron ook nog een *spinimpulsmoment* bezit.



Uit zowel theorie als experiment volgt dat er een analoog verband bestaat tussen het spin impulsmoment \mathbf{S} en het bijhorend magnetisch dipoolmoment $\boldsymbol{\mu}_S$:

$$\boldsymbol{\mu}_S = g_s \frac{e}{2m_e} \mathbf{S}$$

dat volgende grootte heeft:

$$\mu_S = g_s \mu_B \sqrt{s(s+1)}$$

De z -componente wordt gegeven door

$$\mu_{S,z} = g_s \mu_B m_s$$

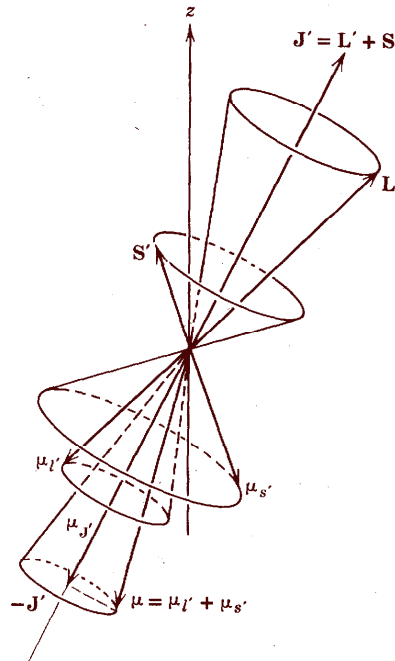
met $m_s = \pm s, \pm (s-1), \dots$ Voor elektronen is $g_s = -2,00229$.

Daar we voor de beschrijving van het magnetisch gedrag de protonen- en de neutronenspin kunnen verwaarlozen, wordt het totaal magnetisch moment van een afzonderlijk atoom gevormd door:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu} &= \frac{e}{2m_e} (-\mathbf{L} + g_s \mathbf{S}) \\ &= -g \frac{e}{2m_e} \mathbf{J}\end{aligned}$$

met g de *Landé g-factor*:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$



Opnieuw hebben we

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

zodat elk atoom een magnetisch moment met grootte

$$\mu = g \frac{e}{2m_e} \sqrt{j(j+1)}\hbar = g \sqrt{j(j+1)}\mu_B$$

bezit. De factor

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} T$$

noemt men het *Bohr magneton*. Hiermee kunnen we ook schrijven:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}_L &= -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} \\ \boldsymbol{\mu}_S &= g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}\end{aligned}$$

Op basis van de hiervoor gegeven bespreking kan men twee grote klassen materialen onderscheiden. Vooreerst deze waarbij we een magnetisch moment verschillend van nul hebben. Dit zijn de *paramagnetische materialen*. Een tweede klasse wordt gevormd door de materialen waarvoor het magnetisch moment nul is. In dit geval zijn de atomen opgebouwd uit elektronen met een gelijk en tegengesteld orbitaal draaimoment én waarbij de spin magnetische momenten elkaar opheffen. Dit zijn de *diamagnetische materialen*. Het magnetisch gedrag wordt dus bepaald door twee verschillende factoren:

- de bewegingsverandering van de geladen deeltjes onder invloed van het aangelegde magnetisch veld: de orbitale bijdrage
- de heroriëntatie van het intrinsiek magnetisch moment van de elektronen in het aangelegde magnetisch veld: de spin bijdrage

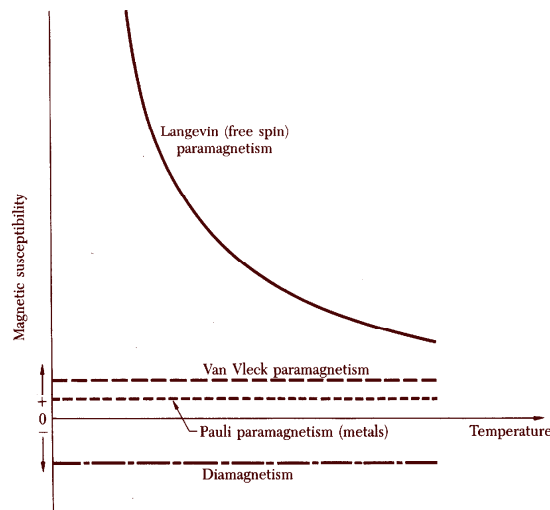
Hierbij moet men een onderscheid maken tussen de verschillende omgevingen van de elektronen:

- elektronen in volledig gevulde schillen
- elektronen in partieel gevulde schillen
- geleidingselektronen

Volgende tabel geeft een overzicht.

| | spin reactie | orbitale reactie |
|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| e^- in volle schil | geen reactie | diamagnetisme (Larmor) |
| e^- in niet-volle schil | paramagnetisme (Langevin) | paramagnetisme (Langevin) |
| geleidingselektronen | paramagnetisme (Pauli) | diamagnetisme (Landau) |

Het verloop van de verschillende types magnetisme in functie van de temperatuur wordt weergegeven in onderstaande figuur.



Merken we tenslotte nog op dat wanneer de atomen een permanent magnetisch dipoolmoment bezitten én er een interactie is tussen deze atomen, zelfs in afwezigheid van een extern magnetisch veld, men dan spreekt over *ferromagnetisme*, *ferrimagnetisme* en *antiferromagnetisme*.

Hoofdstuk II

De verschillende types magnetisme

1 Inleiding

Onder invloed van een uitwendig magneetveld zullen de elementaire magnetische dipolen (ongeacht of ze intrinsiek of geïnduceerd zijn) een veld opbouwen dat het aangelegde veld beïnvloedt. Daar magnetische dipoolmomenten -die opgevat kunnen worden als microscopische stromen- als gevolg hebben dat er een *magnetische inductie* \mathbf{B} gevormd wordt, kunnen we schrijven:

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M})$$

Hierbij is \mathbf{M} de *magnetisatie*, dit is de volume dichtheid van de magnetische dipoolmomenten: μ/V . De evenredigheidsfactor heeft als waarde $\mu_0 = 4\pi 10^{-7} \text{H/m}$. De *magnetische veldsterkte* \mathbf{H} toont enkel verband met macroscopische stromen. Voor sommige magnetische materialen, kan men een lineair verband¹ vinden tussen \mathbf{M} en \mathbf{H} :

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H}$$

zodat

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu \mathbf{H}$$

De dimensieloze grootheid χ noemt men de *magnetische susceptibiliteit*. We zien dus dat er volgend verband bestaat tussen χ en μ :

$$\mu = \mu_0 (1 + \chi) = \mu_0 \mu_r$$

Wanneer de magnetische susceptibiliteit een negatieve waarde vertoont, hebben we een *diamagnetisch materiaal*. Voor *paramagnetische materialen* waarvoor de permanente dipoolmomenten zich aligneren ten opzichte van het uitwendig veld (en deze dus versterken) hebben we een positieve χ .

¹ Voor ferromagnetische materialen maakt men gebruik van de *differentiële susceptibiliteit* (zie 'magnetische hysteresis').

2 Diamagnetisme

2.1 Larmor diamagnetisme

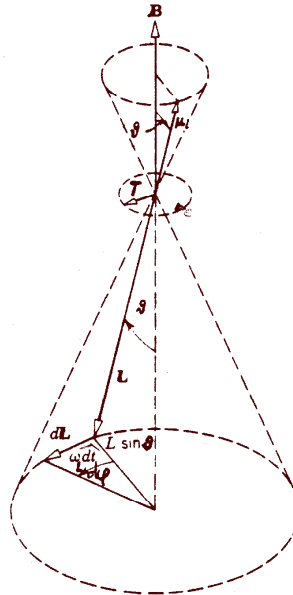
Larmor diamagnetisme wordt veroorzaakt door een interactie tussen het orbitaal draaimoment van de elektronen met een uitwendig magnetisch veld. Deze zal namelijk als gevolg hebben dat er een koppel

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu}_L \times \mathbf{B}$$

op het magnetisch dipoolmoment ontstaat. Door dit koppel wordt een extra potentiële energie verkregen:

$$E_{p,mag} = -\boldsymbol{\mu}_L \cdot \mathbf{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$$

Als het systeem deze energie niet kan dissiperen, blijft de potentiële energie van oriëntatie constant, zodat $\boldsymbol{\mu}_L$ zich niet volgens \mathbf{B} kan aligneren. Hierdoor zal er een precessie beweging van $\boldsymbol{\mu}_L$ en \mathbf{L} rond de richting van \mathbf{B} ontstaan, waarbij de hoek tussen het magnetisch dipoolmoment en het orbitaal draaimoment² behouden blijft.



We bepalen nu de hoekfrequentie ω_L waarbij beiden ronddraaien. Daartoe maken we gebruik van de impulsmomentstelling

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{d\mathbf{L}}{dt}$$

² Daar we werken met gevulde elektronenschillen is de spinbijdrage nul. Ook kunnen, ten gevolge van het Pauli principe, de spins zich niet heroriënteren. Om deze reden maken we enkel gebruik van \mathbf{L} in plaats van $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

Uit de figuur volgt

$$d\varphi \approx \operatorname{tg} \vartheta d\varphi = \frac{dL}{L \sin \vartheta}$$

zodat

$$dL \approx L \sin \vartheta d\varphi$$

en de grootte van het koppel dus gegeven wordt door

$$\tau = L \sin \vartheta \frac{d\varphi}{dt} = L \omega_L \sin \vartheta$$

Rekening houdend met

$$\tau = \mu_L B \sin \vartheta$$

kunnen we dus schrijven:

$$\omega_L = \frac{\mu_L}{L} B$$

Maken we tenslotte nog gebruik van

$$\mu_L = -\frac{e}{2m_e} L$$

dan wordt de *Larmorfrekwentie* gegeven door

$$\omega_L = -\frac{e}{2m_e} B$$

Deze hangt dus niet af van de hoek tussen \mathbf{B} en het vlak waarin het elektron beweegt. Ze is ook onafhankelijk van de straal van de baan. Voor atomen met meerdere elektronen is ze dus voor alle elektronen gelijk. Daar het magnetisch moment gegeven wordt door

$$\mu = \frac{qvr}{2} = \frac{1}{2} q\omega r^2$$

houdt de Larmorprecessie dus in dat er ten gevolge van het uitwendige veld het magnetisch draaimoment zal veranderen met een waarde

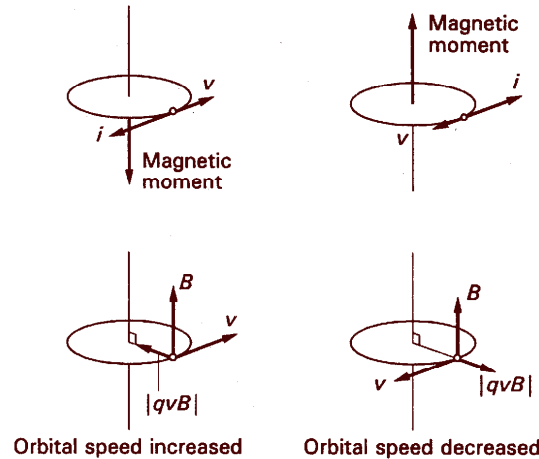
$$\mu = -\frac{1}{4} \frac{q^2 B}{m} r^2$$

Samenvattend kunnen we dus besluiten dat er een bijkomende beweging veroorzaakt wordt door het externe veld. Hierdoor ontstaat er een bijkomende stroom die een verandering van het magnetische moment tot gevolg heeft. We kunnen dit ook als volgt beschrijven. Ten gevolge van een magnetische veld zal de flux gevormd door de stroomkringen veranderen. Rekening houdend met de wet van Lenz ontstaat hierdoor een ems die de oorzaak tegenwerkt. Dit kan door een bijkomende stroom op te wekken en er ontstaat dus een magnetisch moment dat tegengesteld is aan het externe veld. Voor een volume van n niet-interagerende atomen zal er hierdoor een magnetisatie \mathbf{M} ontstaan die tegengesteld is aan het aangelegde veld:

$$\mathbf{M} = -\alpha \mathbf{B} \quad (\alpha > 0)$$

Opmerking

- Wanneer het orbitaal draaimoment van het elektron tegengesteld is aan dat van het uitwendig aangelegd veld, zal dit veld als resultaat hebben dat de draaisnelheid van het elektron toeneemt. Hierdoor neemt ook de stroom toe waardoor we een groter magnetisch moment krijgen dat het uitwendige veld tegenwerkt. Het resultaat is dus een diamagnetisch effect.



- Wanneer het orbitaal draaimoment van het elektron in dezelfde zin is als dat van het uitwendig aangelegd veld, zal dit veld als resultaat hebben dat de draaisnelheid van het elektron afneemt. De stroom neemt af, evenals het magnetisch moment dat in dezelfde richting als het externe veld is. Ook in dit geval is het resultaat dus een diamagnetisch effect.

Hiervóór hebben we gebruik gemaakt van cirkelvormige banen voor de elektronen. Dit stemt niet overeen met de werkelijkheid en het is dan ook beter om $\langle r^2 \rangle$ te schrijven in plaats van r^2 . Deze stelt de gemiddelde straal voor van een baan loodrecht op de richting van het magnetisch veld:

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle$$

Stellen we

$$\langle \rho^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$$

dan hebben we voor een sferisch symmetrische ladingsverdeling ($\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$)

$$\langle r^2 \rangle = \frac{2}{3} \langle \rho^2 \rangle$$

De grootte van het magnetisch moment ten gevolge van het uitwendig veld wordt dus gegeven door

$$\begin{aligned} \mu &= -\frac{1}{4} \frac{q^2 B}{m} \frac{2}{3} \langle \rho^2 \rangle \\ &= -\frac{q^2 B}{6m} \langle \rho^2 \rangle \end{aligned}$$

Voor een atoom met Z dergelijke elektronen is

$$\mu = -\frac{q^2 Z B}{6m} \langle \rho^2 \rangle$$

zodat we voor N atomen per eenheidsvolume

$$\mu = -\frac{q^2 Z N B}{6m} \langle \rho^2 \rangle$$

krijgen. Daar de magnetische susceptibiliteit gegeven wordt door

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{\mu_o \mu_r}{B} M = \frac{\mu_o \mu_r}{B} \mu N$$

volgt dat

$$\chi = -\frac{\mu_o N Z e^2}{6m} \langle \rho^2 \rangle$$

Deze noemt men de *Langevin vergelijking*. Hierbij hebben we gesteld dat B , het veld ter hoogte van het atoom, overeenkomt met het uitwendige veld. In feite moeten we hier gebruik maken van het aangelegde veld min het door het atoom opgewekte veld. Deze laatste is echter verwaarloosbaar (dit geldt niet geldt voor ferromagnetische materialen). Benaderen we $\langle \rho^2 \rangle$ door 0.1 nm , dan kunnen we de *molaire susceptibiliteit* bepalen als

$$\begin{aligned} \chi_{mol} &\approx -\frac{(4\pi \cdot 10^{-7}) (6,02 \cdot 10^{23}) (1,6 \cdot 10^{-19})^2}{6 (9,1 \cdot 10^{-31})} (10^{-10})^2 Z \\ &= -3,6 \cdot 10^{-11} Z \text{ m}^3/\text{mol} \end{aligned}$$

Volgende tabel geeft enkele voorbeelden van deze molaire susceptibiliteit.

| ELEMENT SUSCEPTIBILITY | | ELEMENT SUSCEPTIBILITY | | ELEMENT SUSCEPTIBILITY | |
|------------------------|-------|------------------------|-------|------------------------|-------|
| | | He | -1.9 | Li ⁺ | -0.7 |
| F ⁻ | -9.4 | Ne | -7.2 | Na ⁺ | -6.1 |
| Cl ⁻ | -24.2 | A | -19.4 | K ⁺ | -14.6 |
| Br ⁻ | -34.5 | Kr | -28 | Rb ⁺ | -22.0 |
| I ⁻ | -50.6 | Xe | -43 | Cs ⁺ | -35.1 |

In units of $10^{-6} \text{ cm}^3/\text{mole}$. Ions in each row have the same electronic configuration.

Zoals blijkt uit de hiervoor gegeven bespreking is diamagnetisme een effect dat zich voordoet in alle materialen. Het is echter te klein om te kunnen waarnemen als er ook een permanent magnetisch dipoolmoment aanwezig is.

2.2 Landau diamagnetisme

Onder invloed van een uitwendig veld zullen vrije elektronen een schroefbeweging maken. De frekwentie wordt (zowel klassiek als kwantummechanisch) gegeven door

$$\omega = \frac{eB}{m}$$

Een elektron in een klassieke baan zal aanleiding geven tot een magnetisch veld en we kunnen dus verwachten dat een verzameling van meerdere onafhankelijke elektronen een magnetisch effect zal geven. Hebben we echter thermisch evenwicht, dan zal een statistische berekening, gebruik makend van klassieke fysica, een netto magnetisch moment gelijk aan nul voorspellen. Kwantummechanisch wordt echter het volgende resultaat verkregen:

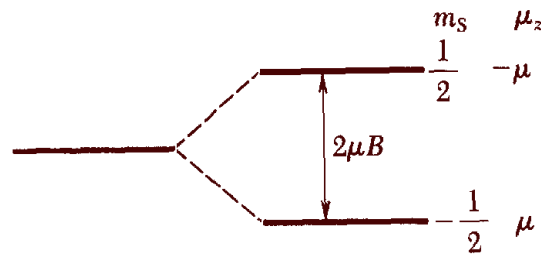
$$\chi = - \left(\frac{\pi}{3} \right)^{2/3} \frac{N^{1/3} \mu_B m}{\pi^2 \hbar^2}$$

Deze waarde komt overeen met 1/3 van de Pauli paramagnetische susceptibiliteit (zie verder) voor een vrij elektron. De elektronen in een metaal zijn echter niet volledig vrij: ze bewegen in een periodieke potentiaal ten gevolge van de roosterionen. Dit kan deels worden opgevangen door gebruik te maken van een effectieve massa in plaats van de elektron massa.

3 Paramagnetisme

3.1 Langevin paramagnetisme - de Brillouin functie

Voor elektronen uit deels gevulde schillen zal een uitwendig magnetisch veld als gevolg hebben dat hun magnetisch moment zich volgens dit veld zal aligneren. Hierbij zijn er twee verschillende mogelijkheden: parallel of antiparallel. We veronderstellen in eerste instantie dat de magnetische momenten onderling geen interactie vertonen. Ten gevolge van het magnetisch veld wordt de ontarting van het energieniveau van het elektron opgeheven en verkrijgen we twee mogelijke niveaus:



met een energie

$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -m_J g \mu_B B = (\pm 1/2) 2\mu_B B = \pm \mu_B B$$

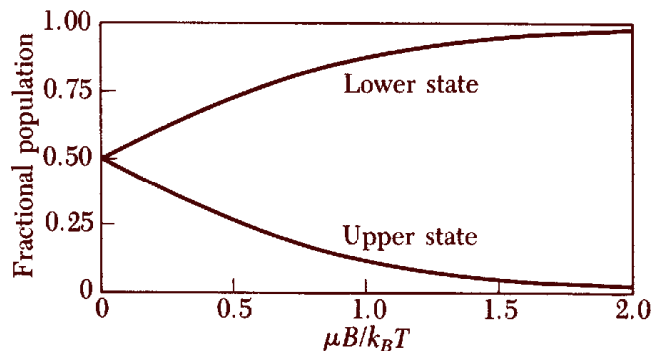
De bezettingsgraad van het onderste niveau wordt gegeven door

$$\frac{N_1}{N} = \frac{e^{\mu_B B/kT}}{e^{\mu_B B/kT} + e^{-\mu_B B/kT}}$$

en dat van het bovenste niveau door

$$\frac{N_2}{N} = \frac{e^{-\mu_B B/kT}}{e^{\mu_B B/kT} + e^{-\mu_B B/kT}}$$

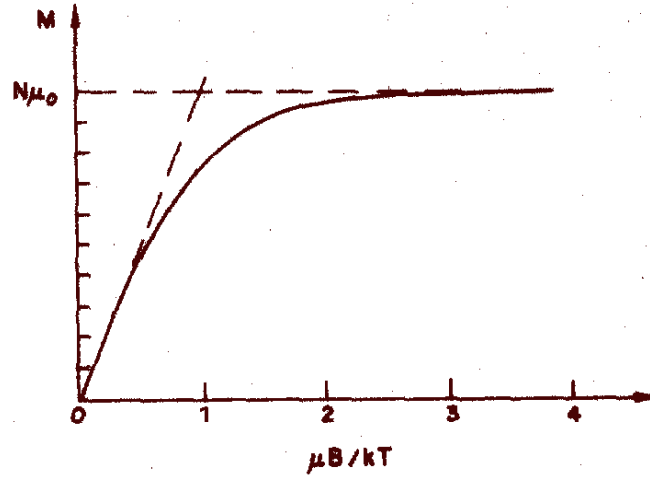
Volgende figuur geeft het verloop van deze functies.



Hiermee kunnen we de resulterende magnetisatie bepalen, met $x = \mu_B B/kT$

$$M = (N_1 - N_2) \mu = N \mu \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = N \mu \tanh x$$

Dit verloop is voorgesteld op onderstaande figuur



Voor zeer kleine x is $\tanh x \cong x$ en kunnen we schrijven

$$M \cong N \frac{\mu_B^2 B}{kT}$$

en dus is³

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{\mu_0 \mu_B^2 B N}{kT} = \frac{C}{T}$$

Deze theorie kan uitgebreid worden voor spin J . Er zullen dan $2J + 1$ energieniveaus ontstaan onder invloed van het uitwendig veld en de magnetisatie wordt gegeven door

$$M = N \frac{\sum_{m_J=-J}^J m_J g \mu_B \exp(-E_{m_J}/kT)}{\sum_{m_J=-J}^J \exp(-E_{m_J}/kT)} = N g \mu_B \frac{\sum_{m_J=-J}^J m_J \exp(m_J X)}{\sum_{m_J=-J}^J \exp(m_J X)} = N g \mu_B \frac{d}{dX} \log \sum_{m_J} e^{m_J X}$$

met als bezettingsgraad voor niveau J :

$$P(m_J) = \frac{\exp(-E_{m_J}/kT)}{\sum \exp(-E_{m_J}/kT)}$$

en

$$E_{m_J} = -m_J g \mu_B B \quad X = g \frac{\mu_B B}{kT}$$

Rekening houdend met

$$\begin{aligned} \sum_{m_J} e^{m_J X} &= e^{-JX} + e^{-(J-1)X} + \dots + e^{(J-1)X} + e^{JX} \\ &= e^{-JX} (1 + e^X + \dots + e^{(2J-1)X} + e^{2JX}) \\ &= e^{-JX} \frac{e^{(2J+1)X} - 1}{e^X - 1} \end{aligned}$$

³ Voor een 3D kristal moet hier nog een factor 1/3 voor komen.

kunnen we de magnetisatie schrijven als

$$\begin{aligned}
 M &= Ng\mu_B \frac{d}{dX} \log \left(\frac{e^{(2J+1)X} - 1}{e^X - 1} e^{-JX} \right) = Ng\mu_B \frac{d}{dX} \log \left(\frac{e^{\frac{2J+1}{2}X} - e^{-\frac{2J+1}{2}X}}{e^{X/2} - e^{-X/2}} \cdot \frac{e^{\frac{2J+1}{2}X}}{e^{X/2}} \cdot e^{-JX} \right) \\
 &= Ng\mu_B \frac{d}{dX} \log \frac{\sinh \frac{2J+1}{2}X}{\sinh \frac{X}{2}} = Ng\mu_B \frac{d}{dX} \left(\log \sinh \frac{2J+1}{2}X - \log \sinh \frac{X}{2} \right) \\
 &= Ng\mu_B \left(\frac{2J+1}{2} \frac{\cosh \frac{2J+1}{2}X}{\sinh \frac{2J+1}{2}X} - \frac{1}{2} \frac{\cosh X/2}{\sinh X/2} \right) \\
 &= Ng\mu_B J \left(\frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} JX - \frac{1}{2J} \coth \frac{JX}{2J} \right)
 \end{aligned}$$

Dit kunnen we schrijven als

$$M = NgJ\mu_B B_J(y)$$

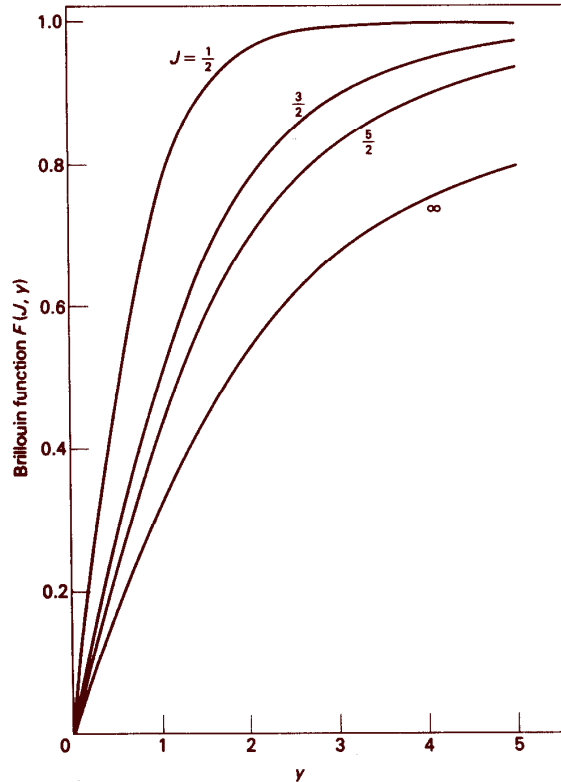
met $B_J(y)$ de *Brillouin functie*. Deze laatste wordt dus gegeven door

$$B_J(y) = \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} y - \frac{1}{2J} \coth \frac{y}{2J}$$

met

$$y = gJ\mu_B B/kT = JX$$

de maximale oriëntatie-energie uitgedrukt thermische energie eenheden. De factor $gJ\mu_B$ is de maximaal toegelaten component van het dipoolmoment van het ion, in de richting van \mathbf{B} . Volgende figuur geeft de Brillouin functie voor enkele verschillende waarden van J .



Voor opnieuw $y \ll 1$ (*het Curie gebied*) kunnen we de volgende reeksontwikkeling toepassen

$$\coth y = \frac{1}{y} + \frac{y}{3} \dots$$

waardoor

$$\begin{aligned} & \frac{2J+1}{2J} \coth \frac{2J+1}{2J} y - \frac{1}{2J} \coth \frac{y}{2J} \\ & \simeq \frac{1}{y} + \frac{1}{3} \left(\frac{2J+1}{2J} \right)^2 - \frac{1}{y} - \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2J} \right)^2 y \\ & = \frac{1}{3} \frac{J+1}{J} y = \frac{1}{3} (J+1) g \frac{\mu_B}{kT} \end{aligned}$$

zodat de magnetisatie benaderd wordt door

$$M \cong N g J \left(\frac{1}{3} (J+1) g \frac{\mu_B}{kT} \right) = \frac{N p^2 \mu_B^2}{3kT}$$

met p het *effectief paramagnetisch Bohr magneton*:

$$p = g \sqrt{J(J+1)}$$

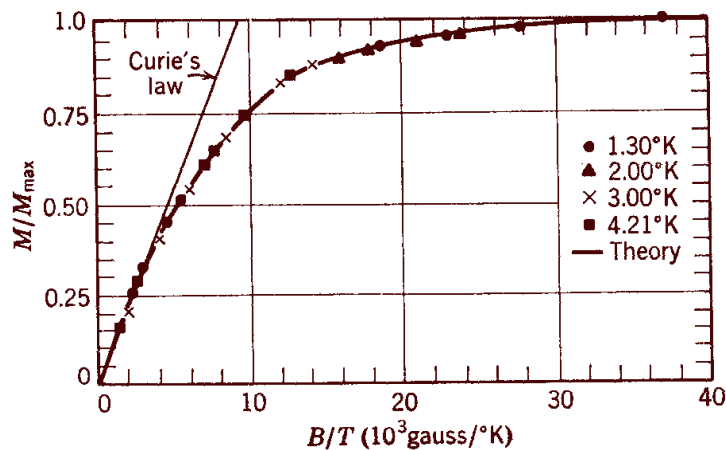
Hiermee kunnen we de *susceptibiliteit* bepalen:

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{\mu_o N p^2 \mu_B^2}{3k B} \frac{1}{T}$$

We bekomen dus de *wet van Curie*:

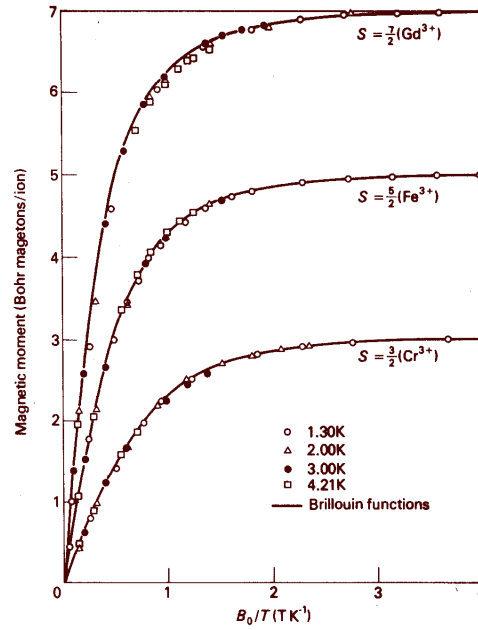
$$\chi = \frac{C}{T}$$

met C een positieve materiaalkonstante, waardoor ook $\chi > 0$. In paramagnetische materialen aligneren de permanente dipoolmomenten zich dus ten opzichte van het uitwendig veld en versterken deze. Deze temperatuursafhankelijkheid van de susceptibiliteit voor paramagnetische materialen (bij kleine y) wordt op onderstaande figuur weergegeven.



A plot of M/M_{\max} versus B/T for the paramagnetic salt potassium chromium sulfate.

Voor $y \gg 1$ (het saturatie gebied) is $B_J(y) = 1$: alle atomaire momenten zijn maximaal gealigneerd met het aangelegde veld. Dit is iets wat normaal enkel voorkomt voor ferromagnetische materialen maar voor sterke velden en bij lage temperaturen heeft men dit toch teruggevonden in enkele paramagnetica, zoals te zien op volgende figuur.



Paramagnetic saturation in salts containing the ions Gd^{3+} , Fe^{3+} and Cr^{3+} . The magnetic moment is plotted against the ratio of the field to the temperature. (After Henry, 1952, *Phys. Rev.*, **88**, 559.)

Bij $T = 0$ hebben we:

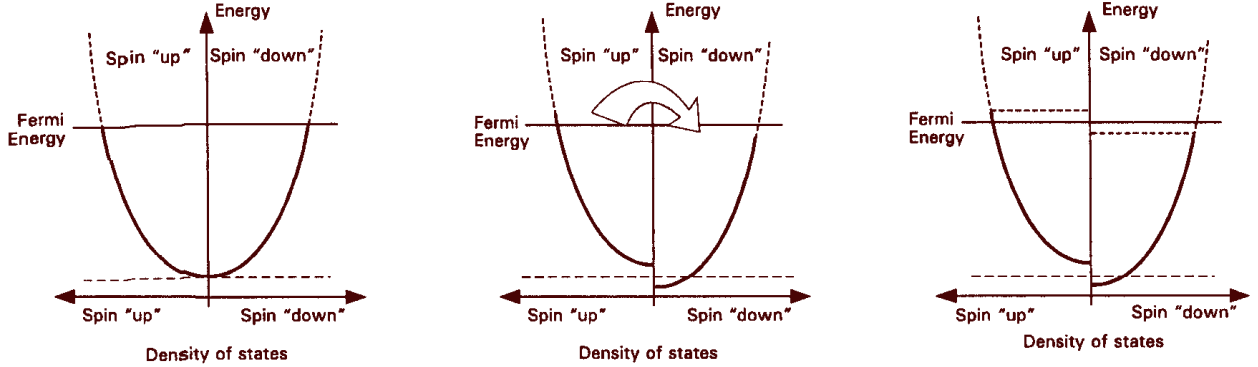
$$\begin{aligned} M(T \rightarrow 0) &\cong NgJ\mu_B B_J(y \rightarrow \infty) \\ &\cong NgJ\mu_B \end{aligned}$$

Dit is de grootst mogelijke magnetisatie of *saturatiemagnetisatie*. Hiermee kan de magnetisatie geschreven worden als

$$M(T) \cong M(0) B_J(y)$$

3.2 Pauli paramagnetisme

Om het paramagnetisme van geleidingselektronen te verduidelijken, maken we gebruik van volgende figuren:



Wanneer er geen magnetisch veld wordt aangelegd, zijn er bij $T = 0$ evenveel elektronen met spin up als met spin down (figuur links). Stel nu dat het externe veld zó snel wordt aangelegd dat de elektronen hun spins nog niet hebben aangepast: het metaal vertoont nog geen netto magnetisch moment (tweede figuur). Het systeem kan zijn energie echter verlagen door de spin van de spin up elektronen om te wisselen naar spin down, dus antiparallel met het uitwendige veld (figuur rechts). Het is deze overmaat van spins die zal aanleiding geven tot een paramagnetisch effect, daar er meer elektronen zijn met magnetisch moment parallel ten opzichte van het aangelegde veld. De grootte ervan hangt dus ook duidelijk af van de dichtheid van de toestanden nabij het fermi niveau.

Het netto magnetisch moment per volume eenheid wordt dus gegeven door

$$M = (N_+ - N_-) \mu_B$$

met N_{\pm} respectievelijk het aantal verloren spin up elektronen en het extra aantal spin down elektronen:

$$N_{\pm} = \int g_{\pm}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

waarbij

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}}$$

de Fermi functie is en

$$g_{\pm}(\varepsilon) = \frac{1}{2} g(\varepsilon \pm \mu_B B) \simeq \frac{1}{2} g(\varepsilon) \pm \frac{1}{2} \mu_B B g'(\varepsilon)$$

de niveau dichtheid. De expansie is toegelaten doordat $g'(\varepsilon)$ van de orde ε_F is en $\mu_B B$ slechts van de orde $10^{-4} \varepsilon_F$ (dus voor $kT \ll \varepsilon_F$).

Dit invullen geeft:

$$N_{\pm} = \frac{1}{2} \int_{\mp \mu_B}^{\varepsilon_F} g_{\pm}(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$\simeq \frac{1}{2} \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \pm \frac{1}{2} \mu_B B \int g'(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

Hieruit volgt dat de magnetisatie gegeven wordt door

$$M = \mu_B^2 B \int g'(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

Door partiële integratie volgt hier uit:

$$M = -\mu_B^2 B \int g(\varepsilon) \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon$$

Bij $T = 0$ is $-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = \delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$, bij hogere T is de correctie hierop slechts van de orde $\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)^2$ zodat we voor temperaturen tot zowat $10^4 K$ kunnen schrijven:

$$M = \mu_B^2 B g(\varepsilon_F)$$

De paramagnetische Pauli's susceptibiliteit is dus

$$\chi = \mu_0 \mu_B^2 g(\varepsilon_F)$$

Deze is (in tegenstelling tot het Langevin ionparamagnetisme) in hoge mate temperatuursonafhankelijk. Volgende tabel geeft de experimentele en de berekende waarden voor alkali metalen.

Experimental and calculated mass susceptibilities of alkali metals.

| | Experiment | | Theory | | |
|----|----------------|---------------|----------|----------------|----------------|
| | (a) | (b) | (c) | (d) | (e) |
| | χ_{total} | χ_{spin} | χ_p | $\chi_p(corr)$ | χ_{total} |
| Li | 3.60 | 3.83 | 1.44 | 4.00 | 3.60 |
| Na | 0.61 | 1.12 | 0.65 | 0.85 | 0.42 |
| K | 0.46 | — | 0.59 | 0.81 | 0.24 |
| Rb | 0.20 | — | 0.30 | 0.49 | 0.11 |
| Cs | 0.26 | — | 0.23 | 0.57 | 0.23 |

All are units of $10^{-2} J T^{-2} kg^{-1}$ SI or $10^{-6} erg Oe^{-2} g^{-1}$ CGS.

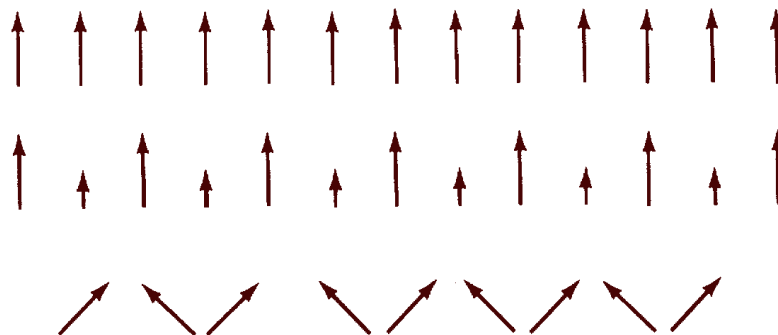
Kolom (b) geeft de waarde van de spin susceptibiliteit, die niet afhankelijk is van diamagnetische effecten. Deze waarden werden bekomen door middel van magnetische resonantie experimenten. Kolom (c) geeft de (theoretische) paramagnetische susceptibiliteit van de vrije elektronen (Pauli). De correctie voor de effectieve massa, exchange interactie en correlatie wordt gegeven in kolom (d). De laatste kolom werd verkregen na een correctie voor diamagnetisme. Kolom (e) (theorie) en kolom (a) (experiment) vertonen een goede overeenkomst.

4 Ferromagnetisme

4.1 Algemeen

Een ferromagnetisch materiaal wordt (theoretisch) gekenmerkt door de aanwezigheid van een macroscopische bulk magnetische dichtheid, zelfs in afwezigheid van een extern veld. Er is dus een spontane magnetisatie. Bij aanleggen van een klein veld zal dit materiaal een groot geïnduceerd magnetisch veld vertonen. De magnetische susceptibiliteit is dus groot voor een ferromagneet. Deze heeft echter geen constante waarde (zie 'magnetische hysteresis').

De elementaire magnetische dipoolmomenten voor een ferromagnetisch materiaal zijn als volgt gerangschikt:



Deze zijn echter niet voor het volledige materiaal in dezelfde richting. Een ferromagnetisch materiaal is opgesplitst in kleinere gebieden, elk met hun eigen magnetisatierichting. Deze gebieden noemt men *domeinen* (zie verder). Ze zijn er de oorzaak van dat een ferromagnetisch materiaal meestal tóch geen netto magnetisch moment zal vertonen in afwezigheid van een extern veld.

4.2 De ferromagnetische Curietemperatuur

Vervangen we in de formules bekomen voor paramagnisme het aangelegde veld \mathbf{B} door de som van het interne en het aangelegde veld: $\mathbf{B}_i + \mathbf{B}$ dan kunnen we gebruik maken van dezelfde formules. Het effectief veld \mathbf{H}_{eff} dat door een atomaire dipool wordt waargenomen, wordt gegeven door de som van het inwendig magnetiserend veld \mathbf{H}_m en het uitwendig aangelegd veld \mathbf{H} :

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H} + \mathbf{H}_m = \mathbf{H} + N_W \mathbf{M}$$

Hierbij hebben we gebruik gemaakt van de veronderstelling dat het inwendig magnetiserend veld een magnetisatie zal veroorzaken met evenredige grootte:

$$\mathbf{H}_m = N_W \mathbf{M}$$

De evenredigheidsconstante noemt men de *Weissconstante* of *moleculaire veldcoëfficiënt*. De achterliggende redenering is gebaseerd op de veronderstelling dat de mate waarin een atomair moment gedwongen wordt zich te aligneren, bepaald wordt door fractie van zijn omgeving die reeds gealigneerd is. Dit wordt uitgedrukt door de magnetisatie.

Daar we de spontane magnetisatie willen bepalen, stellen we $\mathbf{H} = 0$ en we verkrijgen dus voor $M(T)$ volgende formule:

$$M(T) = \frac{kT}{gJ\mu_B\mu_o N_W} y = \frac{kT}{Ng^2J^2\mu_B^2\mu_o N_W} y M(0) = R(T) y M(0)$$

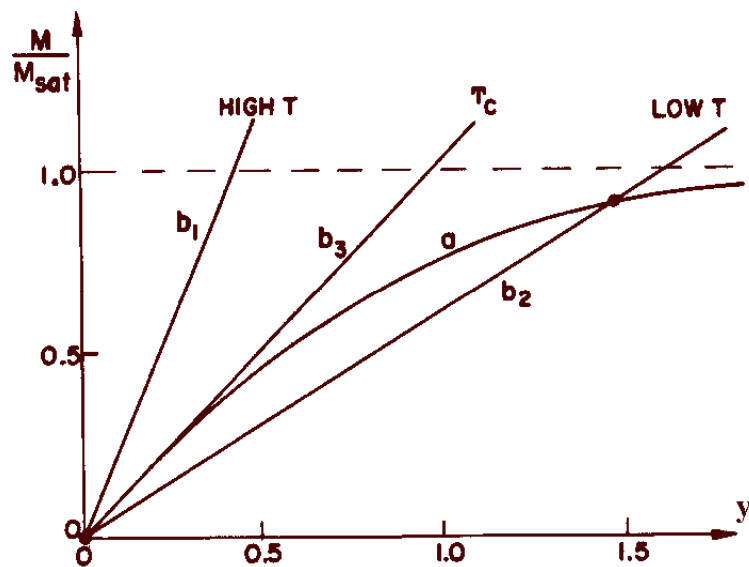
De twee vergelijkingen die de spontane magnetisatie bepalen bij een temperatuur lager dan de Curietemperatuur, zijn dus

$$\begin{cases} M(T)/M(0) = B_J(y) \\ M(T)/M(0) = R(T) y \end{cases}$$

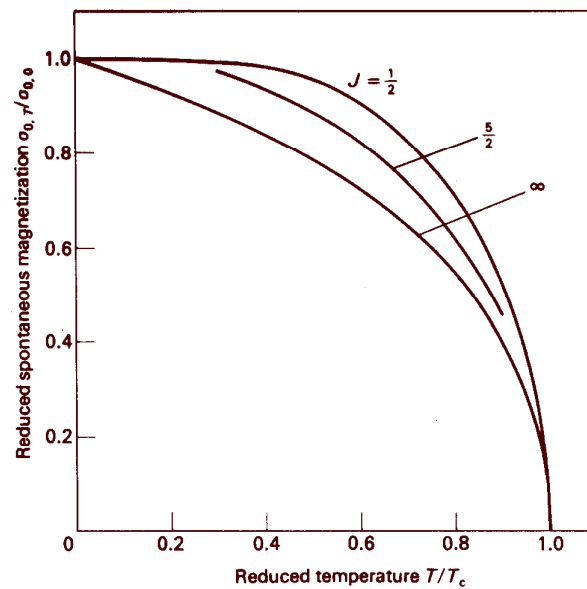
waarbij de eerste de Brillouin curve voorstelt en de tweede een lineair verband geeft. De variabele y wordt gegeven door:

$$y = \frac{g\mu_B J B_m}{kT} = \frac{\mu_o g\mu_B J N_W M(T)}{kT}$$

Volgende figuur geeft de twee vergelijkingen weer.



De spontane magnetisatie bij gegeven temperatuur wordt gegeven door het snijpunt van de rechte met de Brillouin kromme. Bij de Curietemperatuur komt dit snijpunt in de oorsprong te liggen (de rechte wordt een raaklijn) en is er dus geen spontane magnetisatie meer. De waarde van $\frac{M(T)}{M(0)}$ zal dus variëren tussen 0 ($T = T_c$) en 1 ($T = 0$) en enkel afhangen van J , zoals weergegeven op onderstaande figuur:



Bepalen we nu het gedrag nabij de Curietemperatuur en nabij het absolute nulpunt.

✘ nabij de Curietemperatuur

Zoals reeds eerder vermeld, kunnen we voor kleine y volgende reeksontwikkeling gebruiken voor $B_J(y)$:

$$\coth y = \frac{1}{y} + \frac{y}{3} - \frac{y^3}{45} + \dots$$

Dit geeft:

$$\frac{M(T)}{M(0)} = B_J(y) \cong \frac{J+1}{3J}y - \frac{J+1}{3J} \frac{2J^2 + 2J + 1}{30J^2} y^3$$

Bij $T = T_c$ hebben we dus:

$$R(T_c) y = \frac{M(T_c)}{M(0)} = \frac{J+1}{3J}y$$

zodat de Curietemperatuur gegeven wordt door

$$T_c = \frac{N\mu_o g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3k} N_W$$

Hiermee kunnen we het stelsel dat de spontane magnetisatie in functie van de temperatuur bepaalt, schrijven in functie van T/T_c . Via

$$R \frac{T}{T_c} = \frac{J+1}{3J} \Rightarrow R(T) = \frac{J+1}{3J} \left[\frac{T_c}{T} \right]$$

hebben we namelijk:

$$\begin{cases} M(T)/M(0) = B_J(y) \\ M(T)/M(0) = \frac{J+1}{3J} \left[\frac{T}{T_c} \right] y \end{cases}$$

✘ nabij het absolute nulpunt

Voor $T \rightarrow 0$ wordt y zeer groot. We kunnen dan volgende reeksontwikkeling uitvoeren

$$\coth y = \frac{\cosh y}{\sinh y} = \frac{1 + e^{-2y}}{1 - e^{-2y}} = (1 + e^{-2y}) (1 + e^{-2y} + \dots) \cong 1 + 2e^{-2y}$$

waardoor we voor $\frac{M(T)}{M(0)}$ het volgende krijgen:

$$\begin{aligned} \frac{M(T)}{M(0)} &\cong \frac{2J+1}{2J} \left[1 + 2e^{-\frac{2J+1}{J}y} \right] - \frac{1}{2J} \left[1 + 2e^{-\frac{1}{J}y} \right] \\ &\cong 1 - \frac{1}{J} e^{-\frac{1}{J}y} \end{aligned}$$

Daar echter ook (voor $y \rightarrow \infty : M(T) \rightarrow M(0)$)

$$y = \frac{3J}{J+1} \left[\frac{T_c}{T} \right] \frac{M(T)}{M(0)} \cong \frac{3J}{J+1} \left[\frac{T_c}{T} \right]$$

vinden we dus

$$\frac{M(T)}{M(0)} \cong 1 - \frac{1}{J} e^{-\frac{3T_c}{(J+1)T}}$$

We zien dat nabij het absolute nulpunt de afname van de spontane magnetisatie exponentieel van $\frac{1}{T}$ afhangt.

Wanneer de temperatuur boven de Curie temperatuur komt, verdwijnt de spontane magnetisatie: we zitten in *het paramagnetisch gebied*. Leggen we nu een uitwendig veld aan dan zal er een netto magnetisatie ontstaan. Verwaarlozen we de saturatie effecten dan kunnen we als volgt gebruik maken van de hiervoor bepaalde formules (voor kleine y):

$$\frac{M(T)}{M(0)} = B_J(y) \cong \frac{J+1}{3J}y$$

$$M = NgJ\mu_B B_J(y)$$

zodat

$$M = \frac{1}{3}Ng\mu_B(J+1)y$$

met

$$y = \mu_0 g J \mu_B (H + N_W M) / kT$$

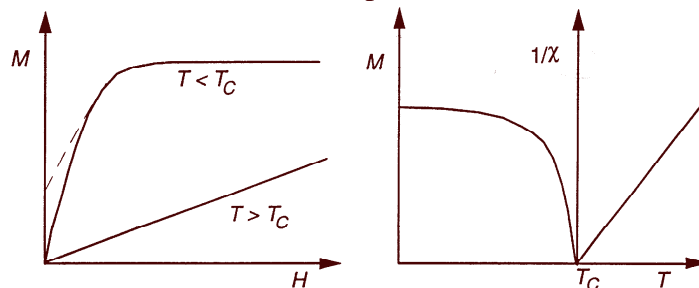
Substitueren we dit, dan vinden we de *Curie-Weiss wet*:

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

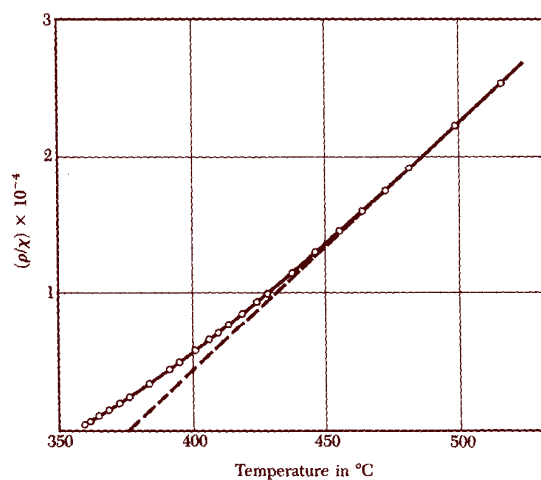
met

$$C = \frac{N\mu_0 g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3k} \quad \text{en} \quad \theta = N_W C$$

Hieruit volgt dat de moleculaire veldtheorie voorspelt dat $\theta = T_c$.



Volgende figuur geeft de experimentele resultaten voor Ni.



We zien dus dat de Curie-Weiss wet een goede overeenkomst vertoont met wat experimenteel bekomen wordt, behalve dicht bij de Curie temperatuur zelf. De tabel hierna geeft een overzicht van enkele experimentele resultaten.

As $T \rightarrow T_c$ from above, the susceptibility χ becomes proportional to $(T - T_c)^{-\gamma}$; as $T \rightarrow T_c$ from below, the magnetization M_s becomes proportional to $(T_c - T)^\beta$. In the mean field approximation, $\gamma = 1$ and $\beta = \frac{1}{2}$.

| | γ | β | T_c , in K |
|-------------------|------------------|-------------------|--------------|
| Fe | 1.33 ± 0.015 | 0.34 ± 0.04 | 1043 |
| Co | 1.21 ± 0.04 | — | 1388 |
| Ni | 1.35 ± 0.02 | 0.42 ± 0.07 | 627.2 |
| Gd | 1.3 ± 0.1 | — | 292.5 |
| CrO ₂ | 1.63 ± 0.02 | — | 386.5 |
| CrBr ₃ | 1.215 ± 0.02 | 0.368 ± 0.005 | 32.56 |
| EuS | — | 0.33 ± 0.015 | 16.50 |

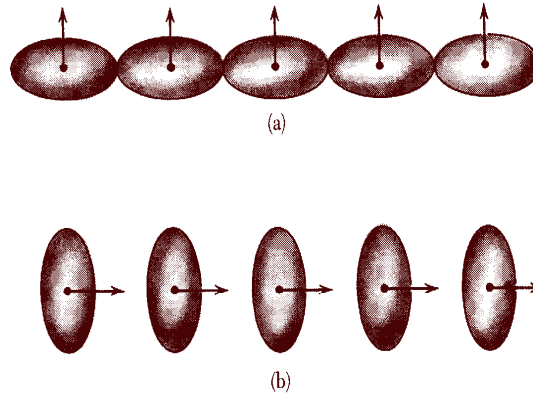
Experimental data collected by H. E. Stanley.

Voor enkele ferromagnetische materialen worden hierna een aantal eigenschappen gegeven.

| Substance | Magnetization M_s , in gauss | | $n_B(0 \text{ K})$, per formula unit | Curie temperature, in K |
|--|--------------------------------|------|--|-------------------------------|
| | Room temperature | 0 K | | |
| Fe | 1707 | 1740 | 2.22 | 1043 |
| Co | 1400 | 1446 | 1.72 | 1388 |
| Ni | 485 | 510 | 0.606 | 627 |
| Gd | — | 2060 | 7.63 | 292 |
| Dy | — | 2920 | 10.2 | 88 |
| MnAs | 670 | 870 | 3.4 | 318 |
| MnBi | 620 | 680 | 3.52 | 630 |
| MnSb | 710 | — | 3.5 | 587 |
| CrO ₂ | 515 | — | 2.03 | 386 |
| MnOFe ₂ O ₃ | 410 | — | 5.0 | 573 |
| FeOFe ₂ O ₃ | 480 | — | 4.1 | 858 |
| NiOFe ₂ O ₃ | 270 | — | 2.4 | 858 |
| CuOFe ₂ O ₃ | 135 | — | 1.3 | 728 |
| MgOFe ₂ O ₃ | 110 | — | 1.1 | 713 |
| EuO | — | 1920 | 6.8 | 69 |
| Y ₃ Fe ₅ O ₁₂ | 130 | 200 | 5.0 | 560 |

4.3 Anisotropie energie

De *anisotropie* of *magnetokristallijne energie* wordt veroorzaakt door het bestaan van voorkeurs-richtingen voor magnetisatie. In een kristalrooster waarvan de ionen namelijk niet-sferische ladingsdistributies of orbitalen vertonen, liggen de baanimpuls momenten vast ten opzichte van de kristalassen. Door de spin-orbitaalkoppelingen liggen dan ook de spin momenten volgens bepaalde voorkeursrichtingen en moet er dus extra energie geleverd worden om het kristal te magnetiseren in een richting die niet overeenkomt met deze voorkeursrichting. Dit wordt weergegeven in volgende figuur.



Asymmetry of the overlap of electron distributions on neighboring ions provides one mechanism of magnetocrystalline anisotropy. Because of spin-orbit interaction the charge distribution is spheroidal and not spherical. The asymmetry is tied to the direction of the spin, so that a rotation of the spin directions relative to the crystal axes changes the exchange energy and also changes the electrostatic interaction energy of the charge distributions on pairs of atoms. Both effects give rise to an anisotropy energy. The energy of (a) is not the same as the energy of (b).

Beschouw bijvoorbeeld ijzer. Deze vertoont bij kamertemperatuur een kubisch kristalrooster. We kunnen de anisotropie energie als volgt uitdrukken in functie van de richtingscosinussen (ten opzichte van de kristalassen):

$$E_K = K_0 + K_1 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_1^2 \alpha_3^2) + K_2 (\alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2) + \dots$$

Hierbij is elke term⁴ equivalent in de α 's (de assen moeten equivalent zijn voor de spontane magnetisatie) en onafhankelijk van de tekens (een omkering van de spontane magnetisatie mag geen invloed hebben). De term bij K_0 is $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2$ maar dit is gelijk aan 1. Deze K -constanten kunnen bijvoorbeeld bepaald worden door de magnetisatiecurves voor de 'gemakkelijke richtingen' te bepalen. Voor een bcc structuur zijn dit de [100] richtingen, de [110] richtingen en de [111] richtingen. De α -coëfficiënten voor deze richtingen zijn respectievelijk:

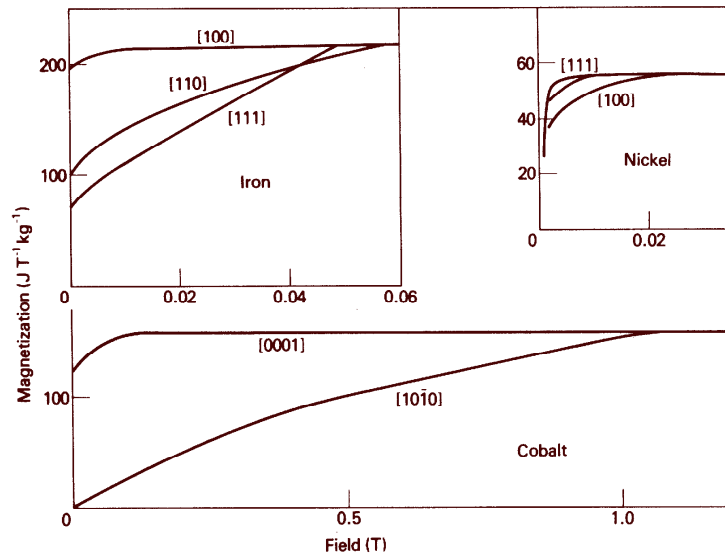
⁴ Daar $1 = (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2)^2 = \alpha_1^4 + \alpha_2^4 + \alpha_3^4 + 2(\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_1^2 \alpha_3^2)$ kan de vierdegraadsterm altijd geschreven worden als een gemengde vierdegraadsterm. Eenzelfde redenering kan toegepast worden op de zesdegraadsterm.

▷ voor $[100]$: $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 0, \alpha_3 = 0$

▷ voor $[110]$: $\alpha_1 = 0, \alpha_2 = 1/\sqrt{2}, \alpha_3 = 1/\sqrt{2}$

▷ voor $[111]$: $\alpha_1 = 1/\sqrt{3}, \alpha_2 = 1/\sqrt{3}, \alpha_3 = 1/\sqrt{3}$

Noemen we W_{100} , W_{110} en W_{111} de geleverde arbeid⁵ voor magnetisatie bij de respectievelijke richtingen, dan komt $W_{111} - W_{100}$ overeen met het verschil tussen E_K voor de richtingen $[111]$ en $[100]$ dus met $K_1/3 + K_2/27$. Met een analoge redenering voor de richtingen $[110]$ en $[100]$ waarbij $E_K = K_1/4$ zien we uiteindelijk dat de magnetisatiekrommen inderdaad deze coëfficiënten bepaalt. Gewoonlijk kiest men K_0 zó dat E_K nul is voor een gemakkelijke richting. Daar voor ijzer $[100]$ de voorkeursrichting voor magnetisatie is, betekent dit dat $K_0 = 0$ is. Experimenteel werd dan bij kamertemperatuur het volgende verkregen: $K_1 = 4,2 \cdot 10^4 \text{ J/m}^3$ en $K_2 = 1,5 \cdot 10^4 \text{ J/m}^3$. Volgende figuren geven enkele experimentele resultaten.



We zien dus dat voor bijvoorbeeld ijzer de $[100]$ richtingen voorkeursassen voor magnetisatie zijn. De magnetisatie gebeurt het moeilijkst langs de $[111]$ richtingen. Voor nikkel is dit juist andersom: $[111]$ is de gemakkelijke richting en dus hebben we: $K_0 = -K_1/3 - K_2/27$.

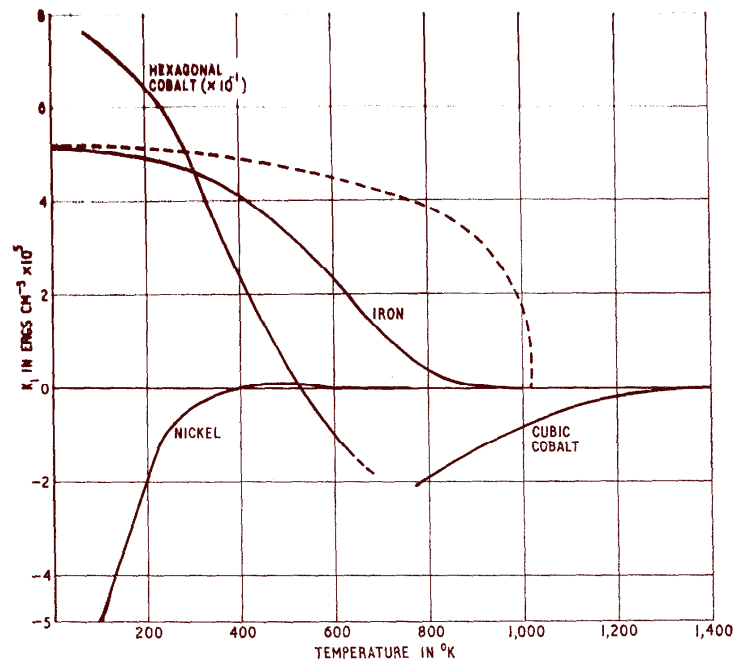
Als volgend voorbeeld beschouwen we kobalt. Het heeft een hexagonale kristalstructuur (bij temperaturen onder $640 - 700 \text{ K}$) en de hexagonale as is de enige gemakkelijke richting. We verwachten dus dat de anisotropie energie een even functie is van de hoek θ tussen de magnetisatie as en deze hexagonale as. We kunnen ze dus schrijven als

$$E_K = K_1' \sin^2 \theta + K_2' \sin^4 \theta + \dots$$

Voor kobalt bij kamertemperatuur is $K_1' = 4,5 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$ en $K_2' = 1,0 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$.

⁵ De oppervlakte ingesloten door de lus (zie paragraaf 'hysteresis') is een maat voor de geleverde arbeid voor magnetisatie.

De constanten zijn sterk temperatuursafhankelijk, zoals te zien in onderstaande figuur.



The variations with temperature of the first anisotropy constants of iron, nickel and cobalt. The broken line represents the relative variation of the spontaneous magnetisation of iron

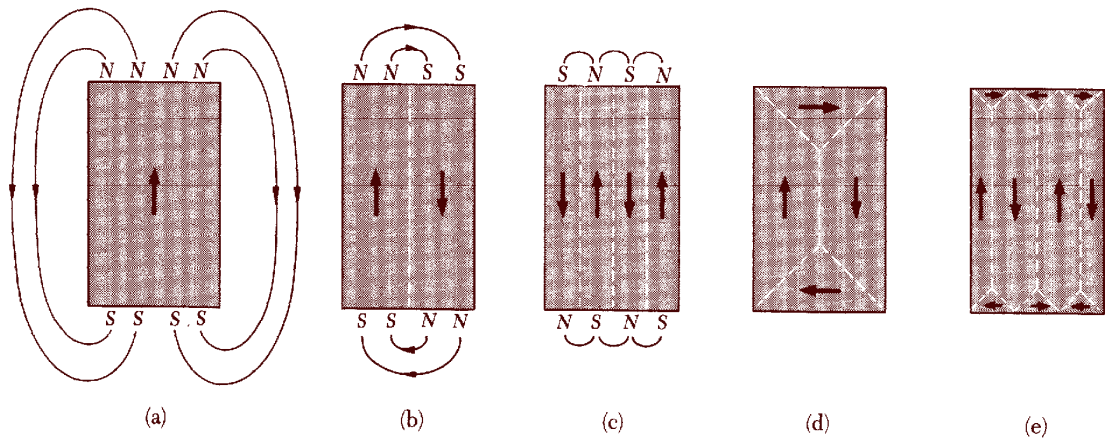
4.4 Magnetische domeinen

4.4.1 Het fenomeen

Zoals reeds eerder vermeld vertonen ferromagnetische materialen beneden de Curie temperatuur een magnetisch moment dat veel kleiner is dan de saturatie magnetisatie. De oorzaak hiervan is terug te vinden in de magnetische domeinen (Weiss, 1907). Beschouw een macroscopisch ferromagnetisch specimen waarvan alle elementaire dipolen evenwijdig zijn⁶. In de ruimte buiten het kristal is er een energiedichtheid

$$U_m = \frac{1}{2} \int B^2 dV$$

Deze magnetostatische energie wordt veroorzaakt door de vrije polen van het gemagnetiseerd specimen. We verdelen nu het materiaal in twee, vier enz. delen en plaatsen de afzonderlijke magneten zó naast elkaar dat de magnetisatie in tegenovergestelde richting is:



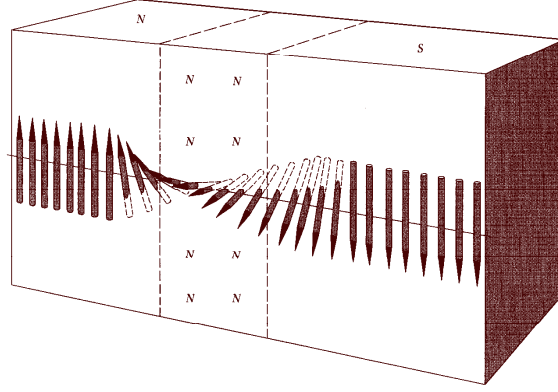
Hierdoor neemt het uitwendig veld af en daalt de energiedichtheid rondom het materiaal. In het materiaal zal er echter een energie toename zijn: een exchange energie ten gevolge van de tegengestelde spins in aaneenliggende domeinen. Deze wandenergie is echter kleiner dan de afname die gebeurt door de uitwendige energie en het opsplitsen in meerdere domeinen is dus een energetisch voordelig proces⁷. Dit gaat echter niet onbeperkt verder daar op een bepaald moment deze beide termen even groot zijn geworden. Een verdere energieverlaging kan nog verkregen worden door het ontstaan van afsluitingsdomeinen (figuren d en e). Hierdoor wordt het uitwendig veld nul en verdwijnt de magnetische energie totaal.

⁶ Dus een permanente magneet met saturatie magnetisatie.

⁷ Een aanwijzing hiervan kan gevonden worden in het feit dat de exchange een short-range interactie is en dus enkel voor de elektronen nabij de overgangen van belang is. Het vormen van domeinen heeft echter voor élk een elektron een lagere magnetische dipool energie als gevolg.

4.4.2 Uitwisselingsenergie

In de vorige paragraaf hebben we de opsplitsing van een ferromagnetisch materiaal in magnetische domeinen besproken. De overgang tussen deze domeinen -de Bloch wand- gebeurt echter niet abrupt. Volgende figuur geeft de meer realistische situatie weer (voor een 180° Bloch wand).



De verandering in spinrichting gebeurt langzaam over een aantal roostervlakken. De uitwisselingsenergie kunnen we bepalen door gebruik te maken van de Heisenbergenergie voor interagerende spins:

$$U = -2J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = -2JS_1S_2 \cos \varphi = -2JS^2 \left(1 - 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right)$$

met J de uitwisselingsintegraal. Wanneer φ klein is, met andere woorden wanneer de opeenvolgende spinvectoren over slechts een kleine hoek verdraaid zijn, is

$$U_{ex} = U(\varphi) - U(0) = JS^2\varphi^2$$

Voor een spinrotatie van in het totaal 180°, die in N gelijke stappen plaatsvindt, is $\varphi = \pi/N$. Per stap wordt er dus een extra energie

$$U_{ex} = JS^2 \left(\frac{\pi}{N}\right)^2$$

verkregen door het niet parallel zijn van naburige spins. Voor een spinlijn van $N + 1$ atomen geeft dit dus:

$$NU_{ex} = JS^2 \frac{\pi^2}{N}$$

De totale extra uitwisselingsenergie is dus lager wanneer de verandering over vele spins is verdeeld: de uitwisselingsenergie tracht de Bloch wanden te verbreden. De dikte van de wand wordt dus bepaald door een evenwicht tussen enerzijds de uitwisselingsenergie en anderzijds de anisotropie energie.

Nemen we bijvoorbeeld een domeinwand parallel met één van de wanden van een kubisch rooster, dan zijn er per oppervlakte eenheid c/a^2 spinlijnen. Hierbij is a de roosterparameter en c het aantal atomen per eenheidscel. Voor een simpel kubisch kristalrooster is deze laatste dus gelijk aan 1, voor een BCC rooster 2 en voor een FCC rooster 4. De uitwisselingsenergie per oppervlakte eenheid van de wand is dus

$$\sigma_{ex} = JS^2 \frac{c\pi^2}{Na^2} = \frac{\pi^2}{2Na} C$$

met $C = \frac{2JS^2}{a}c$ de uitwisselingsconstante. We bepalen nu de anisotropie energie voor een dergelijke wand. De Bloch wand is evenwijdig met het (001) vlak. In deze wand roteren de spins geleidelijk van de [100] tot de [-100] richting. Voor alle voorkomende oriëntaties is dan de richtingscosinus $\alpha_3 = 0$ waardoor de anisotropie energie voor bijvoorbeeld ijzer gegeven wordt door

$$E_K = K_1 \alpha_1^2 \alpha_2^2 = K_1 \cos^2 \theta \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} - \theta \right) = K_1 \cos^2 \theta \sin^2 \theta$$

Voor een Blochwand met dikte gelijk aan één roosterafstand, waarbij de magnetische momenten een hoek θ_i maken met de [100] richting wordt de anisotropie energie (per volume eenheid) dus gegeven door

$$E_{K_i} = aK_1 \cos^2 \theta_i \sin^2 \theta_i = \frac{1}{4}aK_1 \sin^2 2\theta_i$$

met $\theta_i = i \frac{\pi}{N}$. De totale anisotropie energie voor de Bloch wand met dikte Na is dus

$$\sigma_a = \frac{1}{4}aK_1 \sum_{i=0}^N \sin^2 2i \frac{\pi}{N} = \frac{1}{8}aK_1 \sum_{i=0}^N \left(\sin^2 2i \frac{\pi}{N} + \cos^2 2i \frac{\pi}{N} \right) = \frac{1}{8}aK_1 N$$

De evenwichtswanddikte zal deze zijn waarvoor de totale energie per oppervlakte eenheid minimaal is, dus waarvoor

$$\frac{\partial}{\partial N} (\sigma_{ex} + \sigma_a) = -\frac{\pi^2}{2N^2a} C + \frac{1}{8}aK_1 = 0$$

Voor een kubisch rooster hebben we:

$$\begin{aligned} \delta &= Na = 2\pi \sqrt{\frac{C}{K_1}} \\ \sigma &= \frac{\pi}{2} \sqrt{CK_1} \end{aligned}$$

Een analoge berekening voor uniaxiaal anisotrope materialen zou hetzelfde resultaat geven. Voor een oneindig uitgestrekte 2D wand in een uniaxiale HCP structuur vonden Landau en Lifshitz in 1935 volgend resultaat (mits verwaarlozing van K_2):

$$\begin{aligned} \delta &= \sqrt{\frac{C}{2K_1}} \\ \sigma &= 2\sqrt{2CK_1} \\ C &= \frac{4\sqrt{2}JS^2}{a} \end{aligned}$$

4.4.3 Demagnetisatie energie

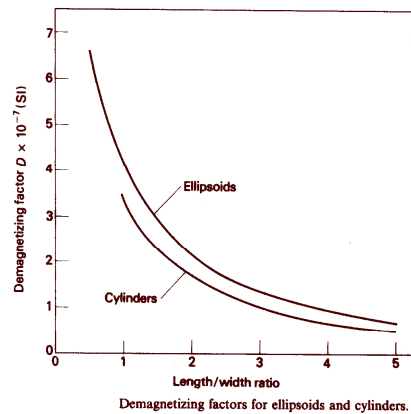
Plaatsen we een geïsoleerd ferromagnetisch materiaal in een saturerend veld B_o dan zullen er aan het oppervlak als het ware magnetische polen aanwezig zijn. Dit wordt veroorzaakt doordat de inwendige magnetisatie uniform moet zijn en er dus aan het oppervlak een discontinuïteit van de normale componente van de magnetisatie ontstaat. Noemen we $B_{o,D}$ het demagnetiserend veld dan wordt het inwendig veld gegeven door

$$B_{o,i} = B_o - B_{o,D}$$

Het demagnetiserende veld komt overeen met het veld dat veroorzaakt wordt indien we de magnetische polen aan het oppervlak afzonderlijk zouden nemen. De *demagnetisatie factor* wordt gedefinieerd als:

$$B_{o,D} = DM$$

Voor omwentelingsellipsoïden is deze factor exact te berekenen.



Voor andere vormen kan die benaderd bepaald worden.

De *magnetostatische energie* per volume eenheid voor een materiaal in aanwezigheid van een extern veld wordt bepaald door de externe en interne velden:

$$E_m = -\mathbf{B}_o \cdot \mathbf{M} - \frac{1}{2} \mathbf{B}_{o,i} \cdot \mathbf{M}$$

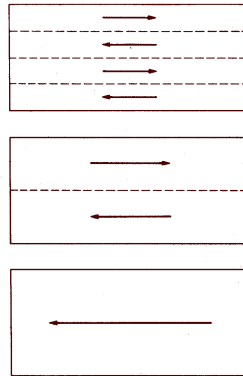
Zónder extern veld hebben we enkel het demagnetiserend veld van het uniform gemagnetiseerd specimen. Men spreekt dan van de '*zelfenergie*':

$$E_s = \frac{1}{2} D \cdot M^2$$

met een factor 1/2 omdat de wederzijdse interacties dubbel werden geteld. Deze zelfenergie is relatief groot⁸ en zal verkleind worden door het ontstaan van meerdere *domeinen*.

⁸ Een ellipsoïde van uniform gemagnetiseerd ijzer (bestaande uit een enkel domein) met een lengte/breedte verhouding van 3,0 heeft een zelfenergie van ongeveer $1,7 \cdot 10^5 \text{ J/m}^3$.

Zo zal voor bijvoorbeeld een rechthoekig specimen gemagnetiseerd langs zijn lengte as, de zelf-energie ongeveer gehalveerd worden door het opsplitsen in twee even grote maar tegengesteld gemagnetiseerde domeinen.

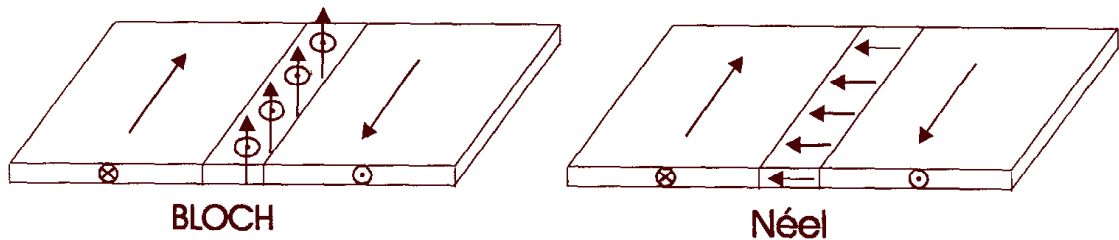


Division of rectangular ferromagnetic block into parallel domains.

Dit komt omdat voor elk domein de verhouding van de lengte ten opzichte van de breedte verdubbeld wordt waardoor het demagnetiserend veld gehalveerd wordt.

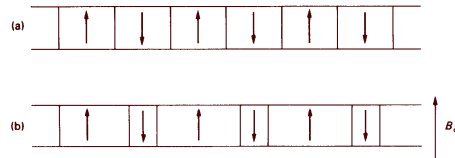
4.4.4 Néel wand

Wanneer het ferromagnetisch materiaal onder de vorm van een dunne film is, zal -wanneer de dikte van de film kleiner is dan de gemiddelde afmeting van een magnetisch domein- de spontane magnetisatie altijd in het vlak van de film liggen. Wanneer tussen de domeinen een Bloch wand zou liggen, ontstaat er in deze wand een magnetisatie loodrecht op het vlak van de film. Hierdoor zouden er vrije polen ontstaan die een inwendig demagnetiserend veld en een uitwendig veld zouden veroorzaken. Dit is echter een energetisch ongunstige situatie en in werkelijkheid zal er voor dunne films een *Néel wand* ontstaan in plaats van een Bloch wand. Bij een Néel wand bevinden de magnetische momenten zich in het vlak van de film waardoor er geen vrije uitwendige polen voorkomen. Het verschil tussen beide wanden wordt in onderstaande figuur weergegeven.

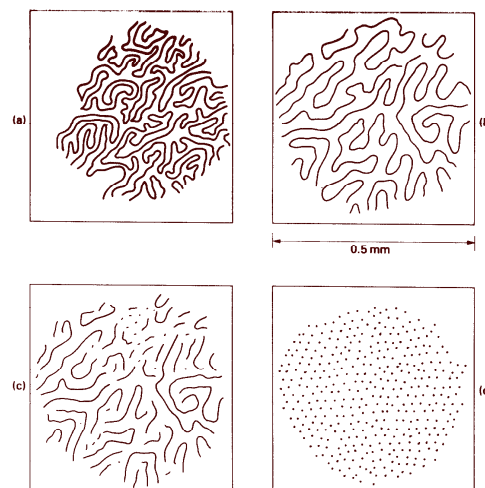


4.4.5 Magnetische domeinbellen

Beschouw een dunne (typisch $20\mu\text{m}$) éénkristallijne film uniaxiaal ferromagnetisch (of ferrimagnetisch) materiaal waarvan de voorkeursas voor gemakkelijke magnetisatie loodrecht is ten opzichte van het vlak van de film. Is het specimen gedemagnetiseerd, dan zullen de afwisselende spontaan-gemagnetiseerde gebieden even een zelfde grootte hebben (figuur a).



Leggen we nu loodrecht op de film een (relatief klein) magnetisch veld aan, dan zullen de domeinen met de gepaste magnetische oriëntatie toenemen ten nadele van hun burens (figuur b). Wanneer er geen anisotropie in het vlak van de film is, zullen de domeinen zich op willekeurige wijze verplaatsen (figuur a van onderstaande figuur).

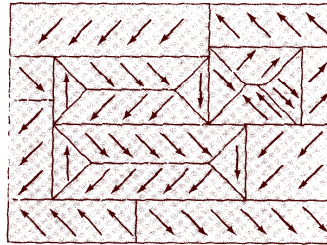


Formation of bubble domains: (a) in no field; (b) in a fixed small field; (c) after one superimposed pulse; and (d) after several pulses.

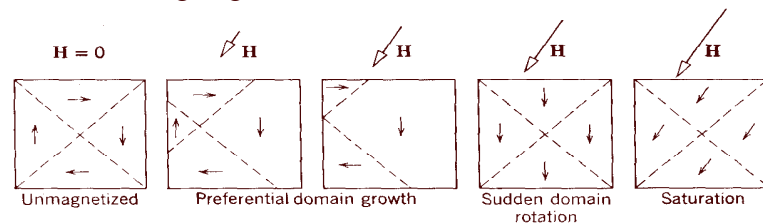
Als het aangelegde constant veld te klein is om saturatie te veroorzaken dan zullen de slecht georiënteerde ('negatieve') domeinen dunner worden (figuur b). Brengen we nu in superpositie een pulserend sterker veld aan, volgens dezelfde zin als het constante veld, dan zullen de negatieve domeinen opgebroken worden in kleine cilindrische (stabiele) domeinen: de 'bellen' (Eng: 'bubbles'). Figuur c geeft deze situatie weer. De bellen hebben een typische grootte van enkele micrometer. Meerdere pulsen zullen resulteren in een toename van het aantal bellen (figuur d). Deze bellen stoten elkaar onderling af. Door gebruik te maken van een veldgradiënt kunnen ze verplaatst worden.

4.5 Magnetische hysteresis

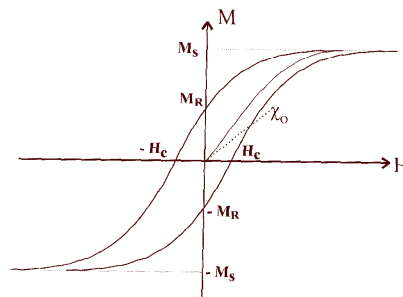
Zoals uiteengezet in de vorige paragraaf zal een ferromagnetisch materiaal in eerste instantie volgende structuur vertonen:



Leggen we nu een uitwendig magnetisch veld aan, dan kan dit twee verschillende effecten als gevolg hebben. Enerzijds kunnen de domeinen die toevallig het best georiënteerd zijn ten opzichte van het externe veld in grootte toenemen ten koste van hun naburige domeinen en anderzijds kunnen sommige domeinen hun dipolen roteren in de richting van dit veld. Welke van de twee situaties zich zal voordoen hangt af van de sterkte van het aangelegde veld. Bij zwakke magnetische velden zal er voornamelijk een toename gebeuren van de meeste geschikte domeinen. Bij sterke magnetische velden verkrijgen we een rotatie. Volgende figuur geeft dit schematisch weer bij een langzame toename van het aangelegde veld



Voor een ferromagnetisch materiaal bestaat volgend verband tussen de magnetisatie \mathbf{M} of het geïnduceerd magnetisch veld \mathbf{B} en het magnetiserend veld \mathbf{H} :



De waarde \mathbf{M}_s komt overeen met de *saturatiemagnetisatie*. Vanaf deze waarde zijn bijna alle magnetische dipolen evenwijdig met het aangelegde veld georiënteerd en kunnen we dus schrijven

$$\mathbf{M}_s = n\boldsymbol{\mu}$$

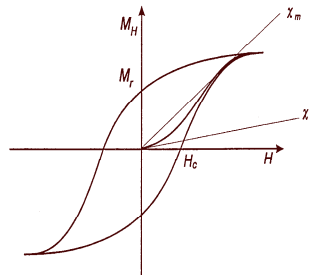
met $\boldsymbol{\mu}$ de dipoolmoment per atoom of ion en n het aantal momenten per volume eenheid. Is het magnetiserend veld tot nul hervallen, dan behoudt het materiaal nog een bepaalde hoeveelheid magnetisatie over: de *remanente magnetisatie*. Deze wordt voorgesteld door \mathbf{M}_r . Om deze remanente magnetisatie tot nul te herleiden, moet er een veld met sterkte $-\mathbf{H}_c$ aangelegd worden. Dit noemt men het *coërcitief veld*. De eerder gegeven formule voor de susceptibiliteit voldoet dus niet bij ferromagnetische materialen. Daarom maakt men gebruik van de *differentiële susceptibiliteit*, bepaald als volgt:

$$\chi = \frac{d\mathbf{M}}{d\mathbf{H}}$$

Naast deze onderscheidt men ook nog de *initiële susceptibiliteit*

$$\chi_o = \left(\frac{d\mathbf{M}}{d\mathbf{H}} \right)_{H=0}$$

en de *maximale susceptibiliteit*.



Doorlopen we de volledige kromme, dan is de verrichte arbeid W_H gelijk aan de ingesloten oppervlakte.

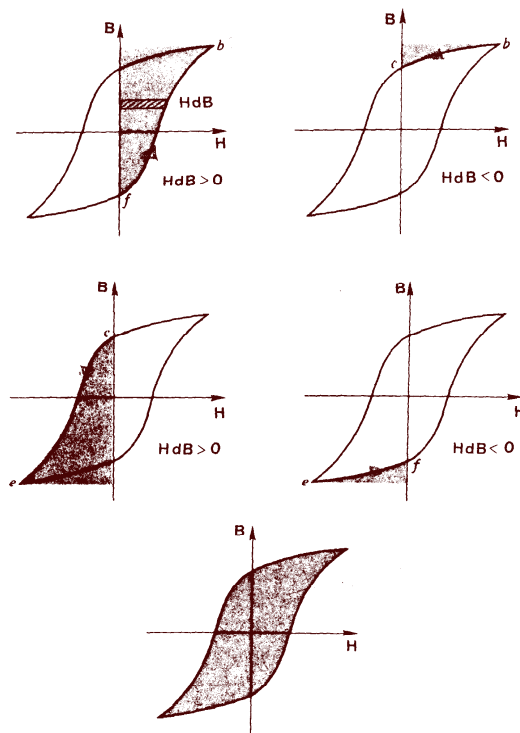
$$W_H = \oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M}_H$$

Met $\mathbf{B} = \mu_o (\mathbf{H} + \mathbf{M})$ en $\oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{H} = 0$ (de oppervlakte onder een HH lus is nul), kunnen we dit ook schrijven als

$$W_H = \frac{1}{\mu_o} \oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{B}$$

We kunnen dit dus aantonen door gebruik te maken van een toroïde van ferromagnetisch materiaal, waarbij we de stroom in de wikkelingen doen variëren.

In de volgende figuur worden de verschillende fasen weergegeven.

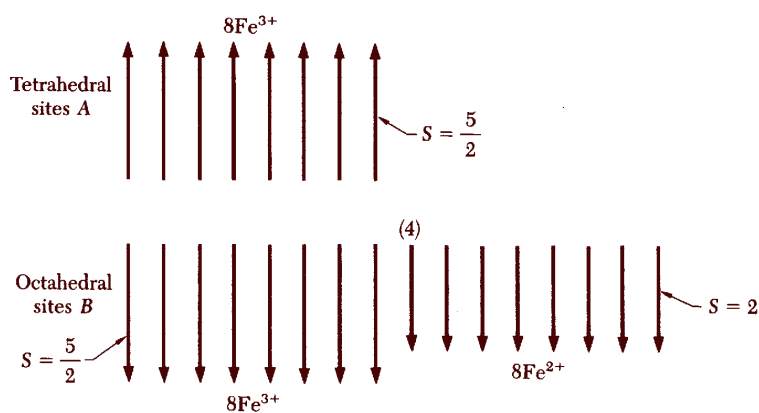


Het vertrekpunt is punt f : $I = 0$. Door de stroom te laten toenemen, komen we uiteindelijk in het punt b . In dit gebied is $HdB > 0$ en de bron levert dus arbeid. Vervolgens daalt de stroom ($b \rightarrow c$) en is $HdB < 0$: de bron ontvangt de energie die opgeslagen werd in het ferromagneticum. Zo verder werkend, kunnen we bij elke fase de door de bron geleverde of ontvangen arbeid bepalen. Deze wordt in bovenstaande figuur gearceerd. Na het volledig doorlopen van de cyclus blijkt duidelijk dat de totale oppervlakte omsloten door de hysteresislus de door de H-bron geleverde arbeid voorstelt, per volume-eenheid. Deze arbeid wordt voornamelijk omgezet in warmte. Van daar dat men deze meestal aanduidt als de *hysteresisverliezen*. Een gevolg hiervan is bijvoorbeeld het opwarmen van transformatoren.

5 Ferrimagnetisme

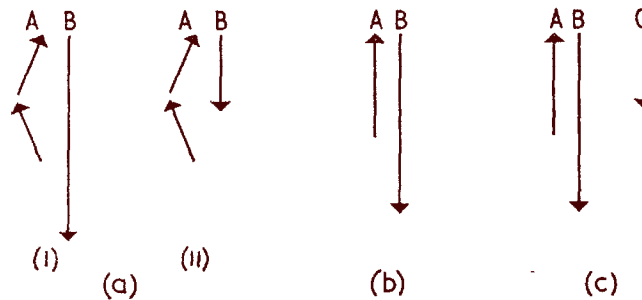
5.1 Algemeen

Beschouw bijvoorbeeld *magnetiet*: Fe_3O_4 . Daar deze in essentie een ionverbinding is, zou men kunnen verwachten dat de saturatie magnetisatie moet kunnen worden afgeleid uit het aantal ongepaarde spins van de afzonderlijke ionen. De Fe^{2+} en de Fe^{3+} ionen hebben respectievelijk zes en vijf 3d elektronen, overeenkomend met $S = \frac{5}{2}$ en $S = 3$, waardoor er vier en vijf ongepaarde elektronen zijn. Indien alle spins parallel zouden gericht zijn (dus een ferromagnetisch gedrag), zou het magnetisch moment dat bekomen wordt bij saturatie magnetisatie moeten gelijk zijn aan $4 + 2 \times 5 = 14\mu_B$ per molecule. Experimenteel heeft men echter een waarde $4,08\mu_B$ per molecule gevonden. De saturatiemagnetisatie bij $T = 0$ komt dus niet overeen met overeen met een parallelle ordening van de magnetische momenten van de paramagnetische ionen waaruit het materiaal is opgebouwd. In 1948 werd door Néel volgende verklaring voorgesteld: indien er een negatieve interactie bestaat tussen de tetrahedrische A ionen en de octahedrische B ionen dan bevordert dit het antiparallel stellen van de spins. Voor magnetiet geeft dit dus $(4 + 5) - 5 = 4\mu_B$: enkel momenten van de Fe^{2+} ionen blijven over.



Naast deze AB interactie moet ook nog rekening worden gehouden met de (veel zwakkere) AA en BB interacties. Men moet dus de interacties tussen alle deelroosters beschouwen.

Enkele mogelijke rangschikkingen van de elementaire magnetische dipoolmomenten worden in onderstaande figuur gegeven.



To illustrate some of the magnetic sublattice structures in ferrimagnetic crystals. (b) is the most common structure in spinel ferrites, with one sublattice having a larger magnetisation (and is therefore represented here by a longer arrow) because it contains more ions, (c) is the structure of rare-earth iron garnets, in which two iron sublattices, A and B, are coupled to a sublattice of rare-earth ions. The triangular structures of (a), and others involving helical patterns of order, are found in chromite spinels and less simple compounds

Gekende voorbeelden ferrimagneten zijn de spinellen. Deze hebben als structuur AB_2O_4 . Door de kubisch dichtste stapeling van de zuurstofionen ontstaan er twee soorten holten: tetraëdrische (A) en octaëdrische (B). Ferrieten, afgeleid van magnetiet, kunnen volgende structuren vertonen:

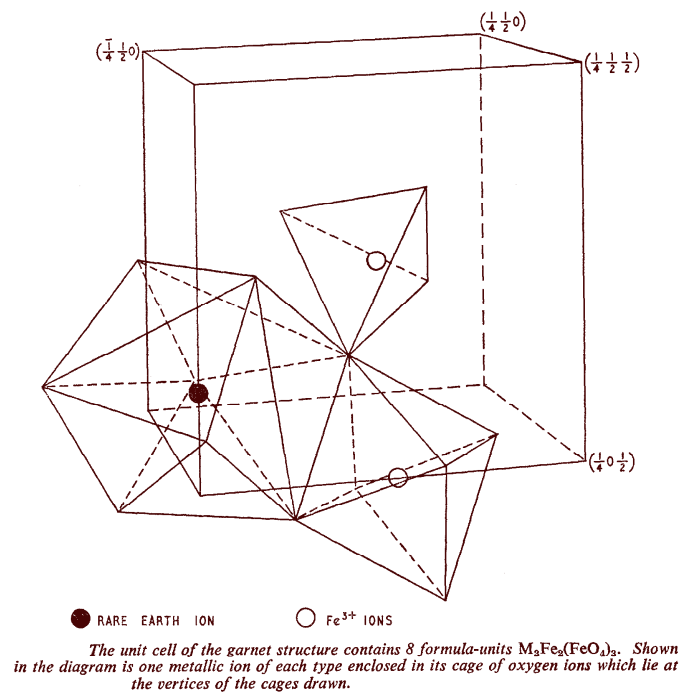
- De normale spinelstructuur, waarbij de 8 tweewaardige metaalionen de A plaatsen bezetten en de 16 Fe^{3+} ionen de B plaatsen: $Me[Fe_2^{3+}]O_4$ (bijvoorbeeld $Zn^{2+}[Fe_2^{3+}]O_4$).
- De inverse spinelstructuur, waarbij de metaalionen de B plaatsen bezetten en de Fe^{3+} ionen de A plaatsen: $Fe^{3+}[MeFe^{3+}]O_4$ (bijvoorbeeld $Fe^{3+}[Ni^{2+}Fe^{3+}]O_4$).
- De intermediaire structuur: $Me_{1-x}Fe_x^{3+}[Me_{1-x}Fe_{2-x}^{3+}]O_4$ (bijvoorbeeld $Mn_{0.8}^{2+}Fe_{0.2}^{3+}[Mn_{0.2}^{2+}Fe_{1.8}^{3+}]O_4$).

Onderstaande tabel geeft enkele ferrimagnetische materialen, met hun kritische temperatuur en hun saturatie magnetisatie.

| MATERIAL | T_c (K) | M_0 (gauss) ^a |
|-----------------------|-----------|----------------------------|
| Fe_3O_4 (magnetite) | 858 | 510 |
| $CoFe_2O_4$ | 793 | 475 |
| $NiFe_2O_4$ | 858 | 300 |
| $CuFe_2O_4$ | 728 | 160 |
| $MnFe_2O_4$ | 573 | 560 |
| $Y_3Fe_5O_{12}$ (YIG) | 560 | 195 |

^a At $T = 0(K)$.

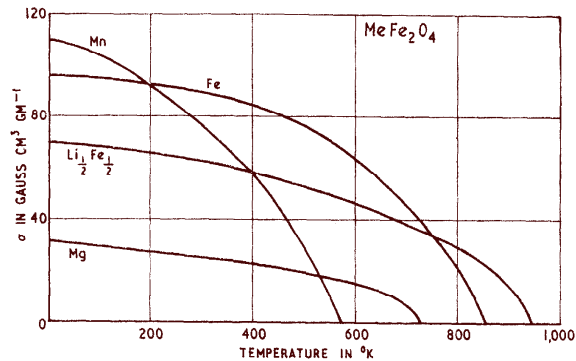
Het laatste element in deze tabel behoort tot de granaten. Deze ferrimagneten hebben als algemene formule: $M_3Fe_5O_{12}$, met M een zeldzame aarde-element (Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb of Lu) of zoals in het voorbeeld: yttrium. Hun kristalstructuur is als volgt.



Deze worden meestal besproken als een afzonderlijke klasse van ferrimagneten, evenals sommige hexagonale ferrieten zoals bijvoorbeeld barium ferriet ($BaFe_{12}O_{19}$, Ferroxdure).

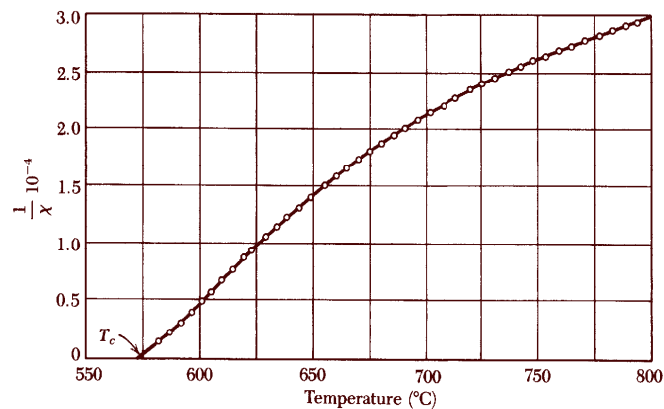
5.2 De ferrimagnetische susceptibiliteit en Curietemperatuur

Bepalen we de spontane magnetisatie in functie van de temperatuur, dan krijgen we een volgend verloop.

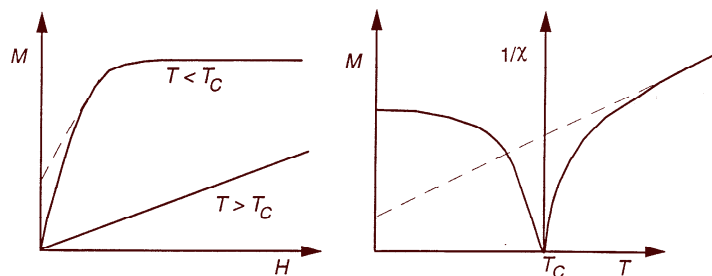


The spontaneous magnetic moment (per gm) of several ferrites (MeFe_2O_4 , in which Me is respectively Mn, Fe, Mg and Li, Fe) as functions of temperature

Voor bijvoorbeeld magnetiet vertoont de (reciproke) susceptibiliteit in functie van de temperatuur volgend experimenteel verband:



Ook ferrimagnetische materialen vertonen dus een transitietemperatuur die we ook hier de *Curie-temperatuur* noemen.



Voor temperaturen lager dan T_c vertoont de magnetisatie in functie van het aangelegde veld een zelfde verloop als voor de ferromagneten. Ze wordt hoofdzakelijk bepaald door de anisotropie en het gedrag van de domeinen. De magnetisatie in functie van de temperatuur wordt nu echter bepaald door onderling gekoppelde Brillouin functies. Hebben we bijvoorbeeld twee subroosters, dan worden de afzonderlijke subroostermagnetisaties gegeven door

$$\mathbf{M}_A(T) = \mathbf{M}_A(0) B_{S_A}(y_A) \quad \mathbf{M}_B(T) = \mathbf{M}_B(0) B_{S_B}(y_B)$$

met

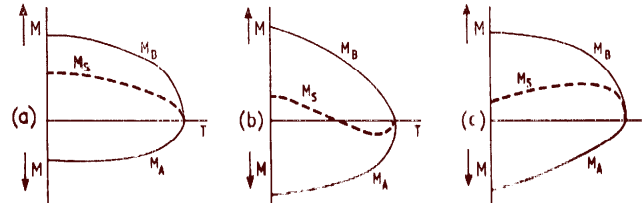
$$M_A(0) = N_A g \mu_B S_A \quad M_B(0) = N_B g \mu_B S_B$$

en

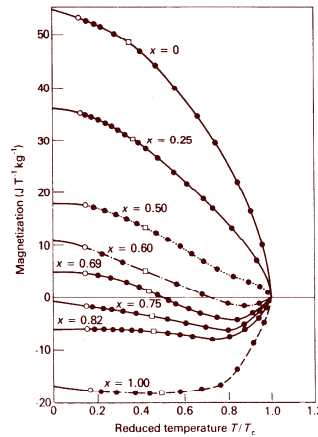
$$y_A = \frac{g \mu_B S_A}{kT} |N_{AA} \mathbf{M}_A - N_{AB} \mathbf{M}_B| \quad y_B = \frac{g \mu_B S_B}{kT} |-N_{BA} \mathbf{M}_A + N_{BB} \mathbf{M}_B|$$

$$B_S(y) = \frac{2S+1}{2S} \coth \frac{2S+1}{2S} y - \frac{1}{2S} \coth \frac{y}{2S}$$

Ook hier moeten deze vergelijkingen grafisch opgelost worden, met de spontane magnetisatie $\mathbf{M}_S = \mathbf{M}_A + \mathbf{M}_B \Rightarrow M_S = M_A - M_B$. Als resultaat krijgen we dergelijke figuren:



De volle lijnen stellen de magnetisaties van de subroosters voor, de gebroken lijn stelt de oplossing voor. Figuur (a) komt overeen met de eerste figuur op de vorige bladzijde. Ook de andere figuren worden experimenteel teruggevonden voor bepaalde ferrimagneten. In figuur (b) zien we dat bij een bepaalde temperatuur de beide magnetisaties elkaar opheffen. Men spreekt in dit geval van een *compensatie systeem* en de temperatuur waarbij $M_s = 0$ is, noemt men de compensatie temperatuur. Onderstaande figuur geeft de experimentele resultaten voor $\text{NiFe}_{2-x}\text{V}_x\text{O}_4$.



Wanneer de temperatuur boven de Curietemperatuur komt, zitten we in het paramagnetisch gebied. Daar de magnetisaties klein zijn voor deze situatie, kunnen we de Brillouinfuncties benaderen door

$$B_S(y) \rightarrow \frac{S+1}{3S}y \quad \text{voor } y \rightarrow 0$$

Hierdoor is

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_A(T) &= \mathbf{M}_A(0) \frac{S+1}{3S} y_A \\ &= \mathbf{M}_A(0) \frac{S+1}{3S} \frac{g\mu_B S_A}{kT} |N_{AA}\mathbf{M}_A - N_{AB}\mathbf{M}_B + \mathbf{H}_a| \end{aligned}$$

zodat

$$M_A(T) = \frac{C_A}{T} |N_{AA}\mathbf{M}_A - N_{AB}\mathbf{M}_B + \mathbf{H}_a|$$

en analoog

$$M_B(T) = \frac{C_B}{T} |-N_{BA}\mathbf{M}_A + N_{BB}\mathbf{M}_B + \mathbf{H}_a|$$

H_a is de grootte van het aangelegde veld. Werken we deze beide vergelijkingen verder uit, dan bekomen we via de definitie van de susceptibiliteit: $1/\chi = \frac{\mathbf{H}_a}{\mathbf{M}_A + \mathbf{M}_B}$ een vergelijking van de volgende vorm (waarbij we veronderstellen dat \mathbf{H}_a parallel is tot de voorkeursas van \mathbf{M}_A en \mathbf{M}_B):

$$\frac{1}{\chi} = \frac{T}{C} + \frac{A}{T - \theta} + \frac{1}{\chi_0}$$

We verkrijgen dus een hyperbolische afhankelijkheid van χ ten opzichte van de temperatuur, in tegenstelling tot de lineaire temperatuursafhankelijkheid voor paramagnetische en ferromagnetische materialen (boven hun Curietemperatuur). Dit hyperbolisch verband blijkt goede overeenkomsten te vertonen met wat experimenteel bekomen wordt, zolang met niet te dicht bij het Curiepunt komt. Voor hoge temperaturen, waarbij de term $\frac{A}{T - \theta}$ verwaarloosbaar wordt, verkrijgen we een Curie-Weiss wet. De *Curietemperatuur* kan uit deze vergelijking bepaald worden door $\frac{1}{\chi} = 0$ te stellen of door de determinant van het stelsel

$$\begin{cases} M_A(T) = \frac{C_A}{T} |N_{AA}\mathbf{M}_A - N_{AB}\mathbf{M}_B + \mathbf{H}_a| \\ M_B(T) = \frac{C_B}{T} |-N_{BA}\mathbf{M}_A + N_{BB}\mathbf{M}_B + \mathbf{H}_a| \end{cases}$$

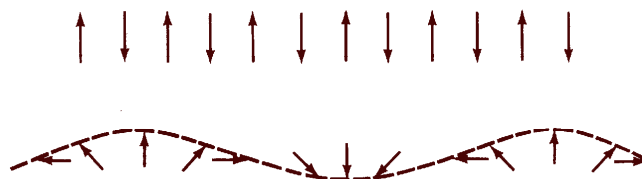
gelijk aan nul te stellen. Dit geeft:

$$T_c = \frac{(C_A N_{AA} + C_B N_{BB}) + \sqrt{(C_A N_{AA} - C_B N_{BB})^2 + 4C_A C_B N_{AB}^2}}{2}$$

6 Antiferromagnetisme

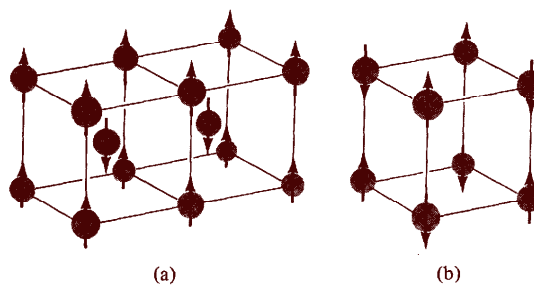
6.1 Algemeen

Wanneer de magnetische momenten van de subroosters zó gerangschikt zijn dat het *totaal* moment (onder een bepaalde temperatuur) nul is, spreekt men van een antiferromagnetisch materiaal. Voor een dergelijk materiaal is de rangschikking van de elementaire magnetische dipoolmomenten zoals voorgesteld op onderstaande figuur.

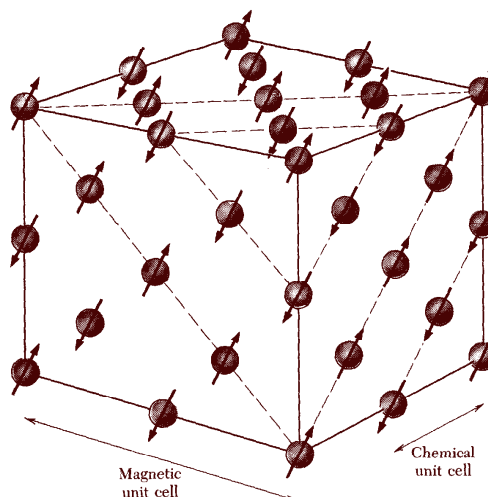


Deze structuur wordt bijvoorbeeld verkregen door een overlapping van twee *dezelfde type* subroosters.

Some simple antiferromagnetic spin arrangements. (a) Antiferromagnetic ordering on a body-centered cubic lattice. Spins of the same kind form two interpenetrating simple cubic lattices. (b) Antiferromagnetic ordering on a simple cubic lattice. Spins of the same kind form two interpenetrating face-centered cubic lattices.



Een voorbeeld van een antiferromagneet is mangaan oxide: MnO .



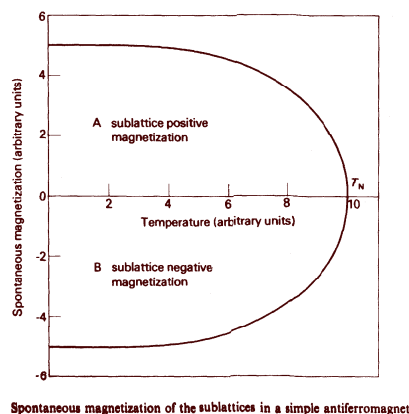
Ordered arrangements of spins of the Mn^{2+} ions in manganese oxide, MnO , as determined by neutron diffraction. The O^{2-} ions are not shown.

Volgende tabel geeft een overzicht van enkele antiferromagnetische kristallen met hun experimentele karakteristieken.

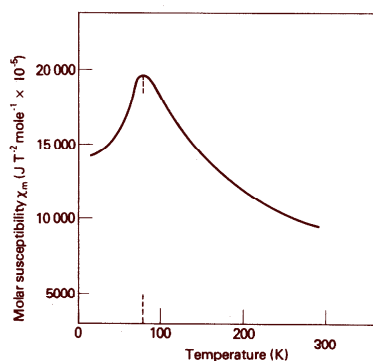
| THE PROPERTIES OF REPRESENTATIVE ANTIFERROMAGNETIC CRYSTALS | | | | | |
|--|-------------------------------|-----------------------------|--|---|-----------------------|
| <i>Material</i> | <i>Crystal Structure Type</i> | <i>Magnetic Ion Lattice</i> | <i>Effective Ionic Moment (μ_B)</i> | <i>Néel Temp. ($^{\circ}\text{K}$)</i> | $-\frac{\theta}{T_N}$ |
| CoO FeO MnO NiO | } Rocksalt | } f.c.c. | 5.1 | 291 | 1.1 |
| | | | 4.6 | 188 | ~ 1.0 |
| | | | 5.95 | 118 | 5.0 |
| | | | 4.6 | 520 | ~ 5.0 |
| Cr ₂ O ₃ Fe ₂ O ₃ | } Corundum | | 3.73 | 307 | 1.6 |
| | | | 5.92 | 953 | 2.1 |
| MnO ₂ MnAu ₂ | } Rutile | } b.c. tetragonal | | 84 | (Helical structures) |
| | | | | 90 | |
| FeS CoS MnTe | } NiAs | } hexagonal | 5.25 | 600 | 1.6 |
| | | | 1.7 | 358 | 1.8 |
| | | | 6.1 | 313 | 2.2 |
| FeF ₂ CoF ₂ MnF ₂ NiF ₂ | } Rutile | } b.c. tetragonal | 5.6 | 79 | 1.5 |
| | | | 5.13 | 37 | 1.3 |
| | | | 5.7 | 72 | 1.6 |
| | | | 3.5 | 74 | ~ 1.4 |
| CoF ₃ CrF ₃ | | } Simple cubic | 2.5 | 460 | 1.6 |
| | | | 3.9 | 80 | |
| KMnF ₃ KFeF ₃ | } Perovskite | } Simple cubic | 5.94 | 88 | 1.8 |
| | | | 5.38 | 113 | |
| CoCl ₂ CrCl ₃ | | | 5.26 | 25 | (Layer structured) |
| | | | 3.9 | 17 | |
| MnBr ₂ MnI ₂ | } CdI ₂ | } Simple hexagonal | 5.84 | 2.16 | 1.0 |
| | | | 5.88 | 3.14 | 1.1 |
| CoCl ₂ ·6H ₂ O | | | 4.61 | 2.3 | |

6.2 De antiferromagnetische susceptibiliteit en de Néeltemperatuur

Voor een antiferromagneet is de spontane magnetisatie in functie van de temperatuur nul. Dit kan verklaard worden met behulp van volgende figuur.

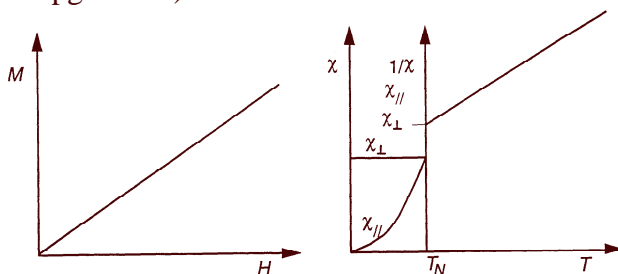


Bepalen we de susceptibiliteit van een antiferromagnetisch materiaal zoals bijvoorbeeld FeF_2 , dan krijgen we een dergelijke karakteristiek:



Measured susceptibility of antiferromagnetic FeF_2 . The Néel temperature T_N is 79 K.

De andere antiferromagneten vertonen een analoog verloop. We zien dus dat ook deze materialen een karakteristieke temperatuur bezitten, die we hier de *Néeltemperatuur* T_N noemen. Ónder deze temperatuur is er een ordening. Verwarmen we het materiaal dan wordt het paramagnetisch (de exchange interactie wordt opgeheven).



Naar analogie met de bespreking van de ferrimagneten veronderstellen we dat het moleculair veld dat ion A ondervindt, evenredig is met de magnetisatie van het subrooster van de B ionen (dus de AB interacties) en met deze van het subrooster A (dus de AA interacties). Hetzelfde geldt voor het moleculair veld van de B ionen, zodat we kunnen schrijven:

$$\mathbf{H}_A = n(\alpha \mathbf{M}_A - \mathbf{M}_B) \quad \text{en} \quad \mathbf{H}_B = n(\beta \mathbf{M}_B - \mathbf{M}_A)$$

met \mathbf{M}_A en \mathbf{M}_B de magnetisaties van de afzonderlijke subroosters en waarbij we dus opnieuw enkel rekening houden met de dichtste en tweede dichtste naburen. Dit herschrijven we (opnieuw zoals in voorgaand paragraaf) als:

$$\mathbf{H}_A = N_{AA}\mathbf{M}_A - N_{AB}\mathbf{M}_B \quad \text{en} \quad \mathbf{H}_B = N_{BB}\mathbf{M}_B - N_{BA}\mathbf{M}_A$$

Daar de beide subroosters equivalent zijn, is nu echter

$$N_{AB} = N_{BA} = A \text{ (eerste naburen)}$$

$$N_{AA} = N_{BB} = \Gamma \text{ (tweede naburen)}$$

zodat

$$\mathbf{H}_A = \Gamma \mathbf{M}_A - A \mathbf{M}_B \quad \text{en} \quad \mathbf{H}_B = \Gamma \mathbf{M}_B - A \mathbf{M}_A$$

Gebruik makend van de moleculaire veld hypothese die stelt dat de interacties tussen de A en B ionen dezelfde magnetisaties veroorzaken in elk rooster als de uitwendige velden met grootte H_A en H_B , kunnen we de spontane magnetisaties voor respectievelijk A en B schrijven als

$$M_A(T) = M(0) B_J(y_A) \quad M_B(T) = M(0) B_J(y_B)$$

met

$$M(0) = \frac{1}{2} N g \mu_B J$$

en

$$y_A = \frac{g \mu_B J}{kT} H_A \quad \text{en} \quad y_B = \frac{g \mu_B J}{kT} H_B$$

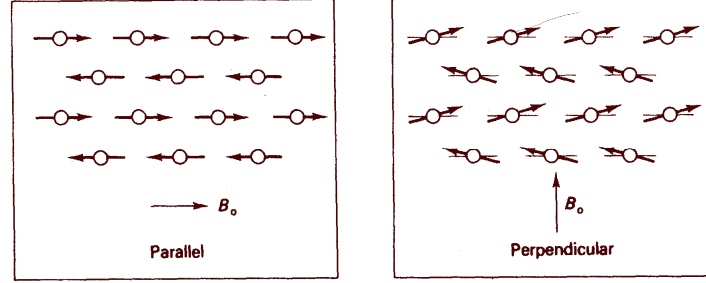
Elk van deze twee magnetisatie vergelijkingen kan opgelost worden als een afzonderlijk ferromagnetisch rooster. Daar zonder uitwendig veld de beide subrooster equivalent zijn, is \mathbf{M}_A even groot als \mathbf{M}_B . Ze hebben echter een tegengestelde zin zodat

$$\mathbf{H}_A = (\Gamma + A) \mathbf{M}_A \quad \text{en} \quad \mathbf{H}_B = (\Gamma + A) \mathbf{M}_B$$

De *Néeltemperatuur* kan bepaald worden door gebruik te maken van de berekeningen voor een ferromagnetisch materiaal. We vinden:

$$T_N = \frac{\frac{1}{2} N \mu_0 g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3k} (\Gamma + A) = \frac{1}{2} C (\Gamma + A)$$

Voor het bepalen van de susceptibiliteit bij temperaturen ónder de Néeltemperatuur moet er rekening worden gehouden met de richting van de spins ten opzichte van het aangelegde veld, zoals schematisch weergegeven in onderstaande figuur.



Meestal gaat men voor een theoretische bepaling van χ een gemiddelde nemen van de parallelle en antiparallele componenten, volgens

$$\chi = \frac{1}{3} (2\chi_{\perp} + \chi_{\parallel})$$

We gaan hier niet verder op in.

Wanneer de temperatuur bóven de Néeltemperatuur komt, zijn de magnetisaties klein en kunnen we opnieuw gebruik maken van de vereenvoudigde vorm van de Brillouin functie:

$$B_J(y) \rightarrow \frac{J+1}{3J} y \quad \text{voor } y \rightarrow 0$$

Hierdoor is

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_A(T) &= M_A(0) \frac{J+1}{3J} y_A [-(A - \Gamma) \mathbf{M}_A + \mathbf{H}_a] \\ \mathbf{M}_B(T) &= M_B(0) \frac{J+1}{3J} y_B [-(A - \Gamma) \mathbf{M}_B + \mathbf{H}_a] \end{aligned}$$

Veronderstellen we nu opnieuw dat \mathbf{M}_A en \mathbf{M}_B parallel zijn met \mathbf{H}_a (wat een aanvaardbare veronderstelling is indien $A\mathbf{M}_A$ en $A\mathbf{M}_B$ veel kleiner zijn dan \mathbf{H}_a), dan geeft dit:

$$\chi = \frac{\mathbf{M}_A + \mathbf{M}_B}{\mathbf{H}_a} = \frac{C}{T - \theta}$$

met

$$C = \frac{N g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3k} = \frac{p_{\text{eff}}^2 N}{3k}$$

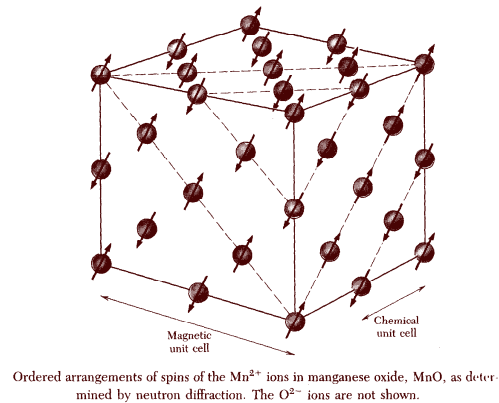
en

$$\theta = \frac{1}{2} C (A - \Gamma)$$

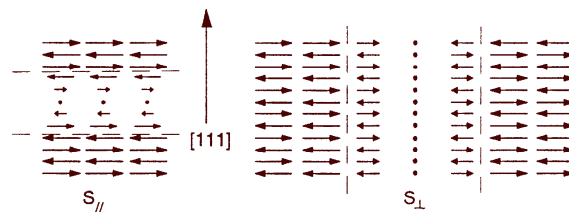
We bekommen dus opnieuw een Curie-Weiss wet. In tegenstelling tot wat we bekwamen voor ferromagnetische materialen, is voor antiferromagnetische materialen θ niet gelijk aan de kritische temperatuur (T_N). De temperatuur θ is negatief.

6.3 Antiferromagnetische domeinen

Niettegenstaande het nul zijn van hun netto magnetisch moment, kunnen er in antiferromagnetische materialen toch magnetische domeinen voorkomen, zoals aangetoond door Roth en Slack (1960). Er kunnen zelfs verschillende soorten domeinwanden voorkomen. Beschouw bijvoorbeeld opnieuw MnO:



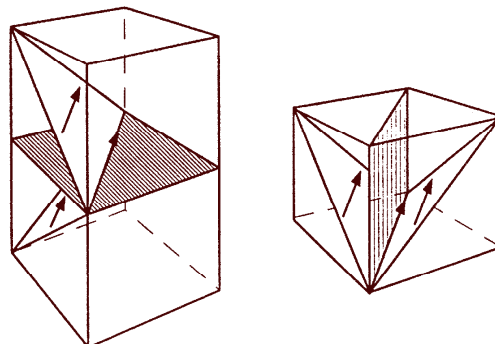
Zoals te zien is op de figuur kunnen er domeinwanden loodrecht of volgens de (111) vlakken gevormd worden. Deze noemt men *spinrotatiewanden* of kortweg *S-wanden*.



Twee mogelijke S-180°-wanden

Spinrotaties van $\pi/3$, $2\pi/3$ en π zijn mogelijk.

Naast dit type van domeinwanden kunnen er ook nog domeinwanden ontstaan ten gevolge van de vorming van magnetische *tweelingstructuren*: *T-wanden*.



Twee mogelijke T-wanden

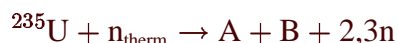
Hoofdstuk III

Experimentele technieken

1 Neutronen diffractie

1.1 Inleiding

Antiferromagnetische materialen vertonen geen uitwendig magnetisch veld. Om hun magnetische structuur te vinden, moet er dan ook gebruik worden gemaakt van technieken die de inwendige velden meten. Een mogelijkheid hiervoor is door gebruik te maken van neutronen. Een neutron bezit namelijk een magnetisch moment. Voor het onderzoek van de kristalstructuur moet men gebruik maken van neutronen met een de Broglie golflengte die overeenkomt met de interatomaire kristalafstanden: *thermische neutronen*. Deze worden meestal verkregen via



waarbij men bijvoorbeeld water als moderator gebruikt. Een andere mogelijkheid is

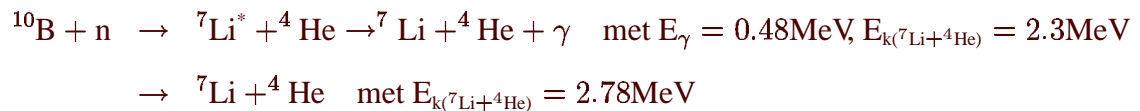


waarbij de thermische neutronen verkregen worden via het splitsen ('to spall'=splitsen, versplinteren) van zware elementen door deze te bombarderen met hoge energie protonen (800 MeV). Wordt een neutron verstrooid door een atoom, dan zijn er in hoofdzaak twee verschillende processen mogelijk. Naargelang de interactie gebeurt met de kern of met de elektronen, spreekt men van *nucleaire verstrooiing* of *magnetische verstrooiing*. De eerste kan - in analogie met X-straal diffractie- gebruikt worden om informatie in verband met de ruimtelijke structuur te verkrijgen, de tweede voor informatie in verband met de magnetische structuur. Röntgendiffractie detecteert echter slechts de ruimtelijke ladingsdistributie van de elektronen, ongeacht deze ladingsdichtheid al dan niet gemagnetiseerd is.

De detectie van de neutronen gebeurt door middel van BF₃ of He detectoren. Reden hiervoor is dat neutronen geen lading vertonen en dus niet kunnen gedetecteerd worden via een ionisatieproces. Daarom gaat men gebruik maken van nucleaire processen met hoge kinetische energie.

a) boorfluoride detector

Deze detector bestaat uit een proportionele teller gevuld met BF₃ gas, aangerijkt met het ¹⁰B isotoop. De reactie is:



waarbij de verhouding van het eerste reactieverloop ten opzichte van het tweede 93/7 bedraagt. De Li en He kernen zorgen dan voor een ionisatie van het gas. Door middel van een hoogspanning worden dan de ladingen gescheiden en als pulsen gedetecteerd.

a) helium detector

In deze detector bestaat het gas uit ³He. De reactie is:



Hierbij wordt niet rechtstreeks de energie van het neutron gemeten maar wel de aankomsttijd.

1.2 Het diffractiespectrum

1.2.1 Nucleaire verstrooiing

De posities van de lijnen in het poeder diffractiepatroon worden op dezelfde manier bepaald als bij röntgendiffractie.:

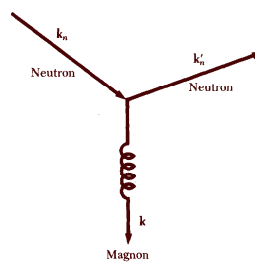
$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2} |\mathbf{G}|$$

met $|\mathbf{G}|$ de grootte van de reciproke roostervector. De bekomen amplitudes bij X-straal diffractie zijn echter niet gerelateerd met deze bekomen bij neutronendiffractie. Ook de relatieve intensiteiten zullen in het algemeen andere waarden vertonen. De voordelen van neutronendiffractie ten opzichte van röntgendiffractie zijn:

- De verstrooiingsamplitude is constant en niet hoekafhankelijk. Alle verstrooiingsbijdragen zijn dus even groot, tot hoge verstrooiingshoeken. Bij X-straaldiffractie neemt de verstrooiingslengte sterk af bij grote hoeken (ten gevolge van de ruimtelijke elektronenverdeling): de elektronische vormfactor.
- Twee naburige elementen kunnen zeer sterk verschillende verstrooiingslengtes hebben. Bij X-straaldiffractie is dit niet het geval daar de verstrooiingslengte ongeveer evenredig is met het aantal elektronen.
- Ook lichte elementen kunnen een sterke bijdrage hebben.

1.2.2 Magnetische verstrooiing

Bij de verstrooiing van een neutron door magnetische interactie, wordt er een *magnon* gecreëerd.



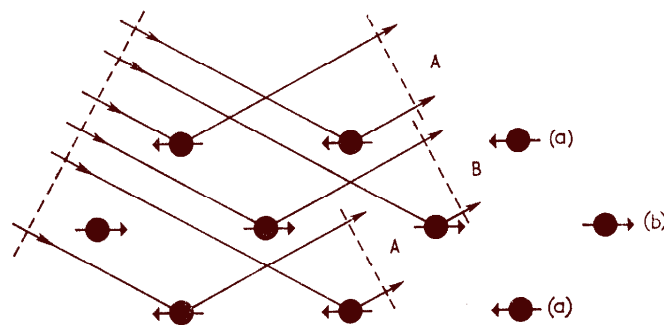
Bij dit proces gelden volgende behoudswetten:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_n &= \mathbf{k}'_n + \mathbf{k} + \mathbf{G} \\ \frac{\hbar^2 k_n^2}{2M_n} &= \frac{\hbar^2 k_n'^2}{2M_n} + \hbar\omega_k \end{aligned}$$

1.2.3 Opbouw van het spectrum

Beschrijvend

Boven de Néeltemperatuur bezit een antiferromagnetisch kristal enkel een kristallografische structuur. Komt de temperatuur echter onder de Néeltemperatuur dan krijgt het kristal een bijkomende periodiciteit ten gevolge van het ontstaan van magnetische subroosters. Daar het magnetisch moment van de neutronen interageert met dit van de ionen, zal deze ordening aanleiding geven tot extra lijnen in het spectrum. Beschouw bijvoorbeeld volgend bc kristal:



Indien de ionen geen magnetisch moment zouden vertonen, zou bij de hoek waarvoor de monochromatische neutronenbundel constructieve interferentie vertoont na diffractie op de (a)-vlakken, destructieve interferentie optreden met het golffront van het naburig (b)-vlak. Er treedt dus geen Bragg reflectie op voor deze hoek. Indien de ionen echter een magnetisch moment vertonen en deze voor het (a)-vlak tegengesteld zijn aan deze voor het (b)-vlak, zal -daar er een bijkomende (magnetische) verstrooiing optreedt- de amplitude van het op het (a)-vlak gereflecteerde golffront verschillend zijn ten opzichte van deze die gereflecteerd wordt op het (b)-vlak. De destructieve interferentie is dus niet meer maximaal en er zal een bijkomende lijn optreden in het spectrum. Daar de werkzame doorsnede voor neutronverstrooiing hoekafhankelijk is, kan dan ook informatie gewonnen worden in verband met de magnetische structuur van het kristal. Indien de ionen magnetisch zijn maar geen ordening vertonen, zal er echter een diffuse magnetische verstrooiing optreden, in alle richtingen. In dit geval is er dan ook geen bijkomende informatie. Vandaar het belang van de Néeltemperatuur.

Theoretisch

Het neutronen diffractiespectrum vertoont een reeks pieken, die elk ongeveer een gaussisch verloop hebben. De breedte van de pieken wordt hoofdzakelijk bepaald door de collimatie en door de mozaïekverdeling in het monochromatorkristal. Tevens is deze afhankelijk van de diffractiehoek en kan geschreven worden als

$$B_k = U \tan^2 \theta_k + V \tan \theta_k + W$$

De pieken worden dan beschreven door de functie

$$G_k(\theta) = A_k \frac{2\sqrt{\ln 2}}{B_k \sqrt{\pi}} \exp \frac{4 \ln 2 (2\theta - 2\theta_k)^2}{B_k^2}$$

waarbij A_k de oppervlakte van de piek voorstelt vermits de gaussfunctie genormeerd is. Voor kleine hoeken vertonen de pieken een asymmetrie waardoor een corrigerende factor

$$1 - P (2\theta - 2\theta_k)^2 S / \tan \theta_k$$

wordt toegevoegd, met P een assymetrie-parameter en S de waarden -1, 0 en +1 aanneemt naargelang $\theta - \theta_k$ negatief, nul of positief is. Voor de achtergrond wordt dikwijls een exponentiële functie gekozen van de gedaante

$$A_o = b_1 \exp \left(\frac{-2\theta_i}{b_2} \right) + b_3$$

Het volledige spectrum wordt bijgevolg gegeven door

$$Y(\theta) = A_o + \sum_k A_k \frac{2\sqrt{\ln 2}}{B_k \sqrt{\pi}} \exp \frac{4 \ln 2 (2\theta - 2\theta_k)^2}{B_k^2} [1 - P (2\theta - 2\theta_k)^2 S / \tan \theta_k]$$

De aanpassing van deze formule aan het experimenteel spectrum kan gebeuren op een analoge manier zoals bij Mössbauerspectroscopie, waarbij er een aantal lineaire parameters b_1 , b_3 en A_k voorkomen. In een eerste stap worden uit deze aanpassing de intensiteiten A_k bepaald waarbij de functie

$$F = \sum_i \frac{(Y_i - y_i)^2}{Y_i}$$

geminimaliseerd wordt, met Y_i de berekende en y_i de experimentele waarden. In een tweede stap worden de theoretische piekintensiteiten berekend aan de hand van een model dat zowel door de kristallografische als magnetische structuurbijdragen bevat. Deze worden gegeven door

$$A_{th,k} = \frac{\mu_{hkl} F_{hkl}^2 \alpha_{hkl} \exp(-2B \sin^2 \theta / \lambda^2)}{\sin \theta \sin 2\theta}$$

met

μ_{hkl} : de multipliciteit van de netvlakken

α_{hkl} : de absorptiecoëfficiënt, die voor $\theta < \pi/4$ nagenoeg constant blijft

F_{hkl} : de structuurfactor

B : de gemiddelde Debye-Waller factor

Om nu het model te verifiëren aan de waargenomen intensiteiten wordt gebruik gemaakt van de betrouwbaarheidscoëfficiënt gegeven door

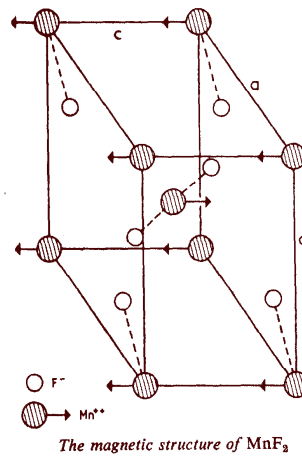
$$R = \frac{\sum_k |\sqrt{A_k} - \sqrt{\eta A_{k,th}}|}{\sum_k \sqrt{A_k}} \quad \text{met } \eta = \frac{\sum_k \sqrt{A_k}}{\sum_k \sqrt{A_{k,th}}}$$

vanwege het relatief karakter van de intensiteiten. De twee stappen in deze analyseprocedure worden nu dikwijls door één enkel analyseprogramma uitgevoerd (zgn Rietveldanalyse), waarbij zelfs de reflectiehoeken rechtstreeks berekend worden aan de hand van aan te passen roosterparameters en de in te geven ruimtengroep voor de kristallografische en magnetische structuur.

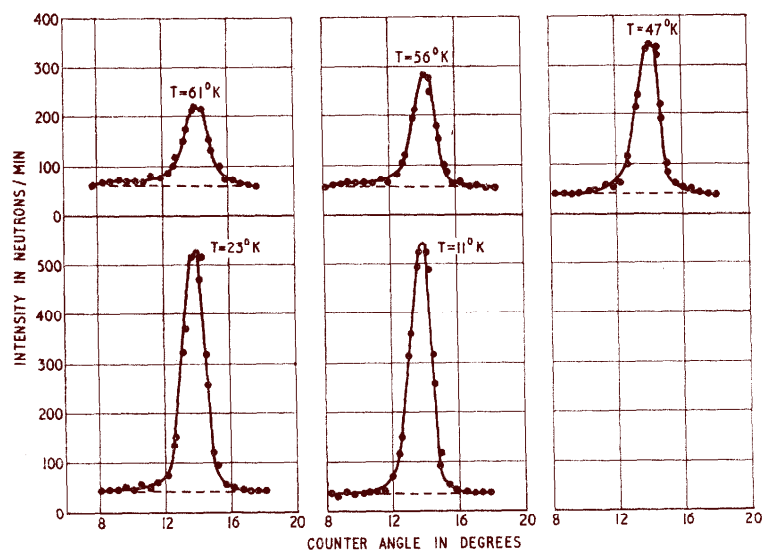
1.3 Enkele resultaten

1.3.1 Mangaandifluoride

Deze bezit de bc tetragonale rutielstructuur (TiO_2), evenals MnF_2 , FeF_2 en CoF_2 .

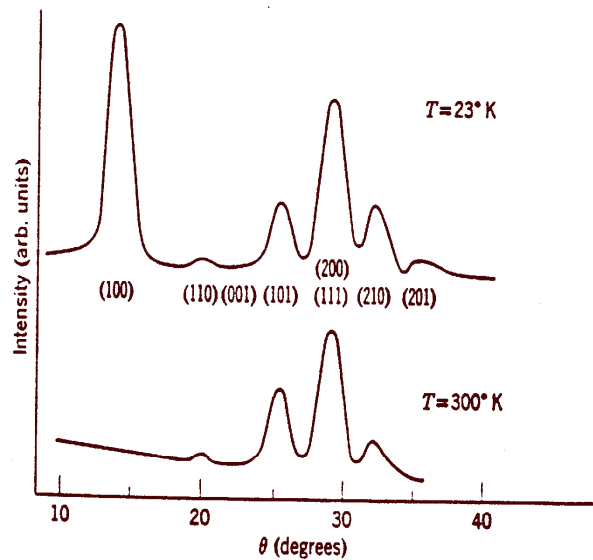


Voor bijvoorbeeld het (100) vlak vertoont het neutronen diffractiepatroon volgend verloop:



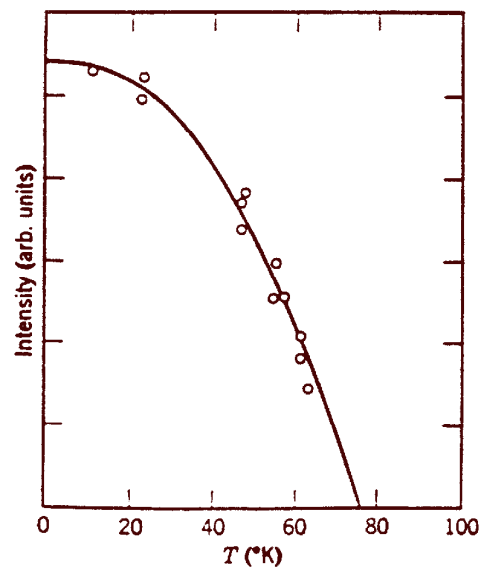
Hieruit volgt dat dit vlak een Bragg reflectie vertoont waaruit volgt dat de metaalionen op de hoeken een tegengesteld moment hebben ten opzichte van deze in het centrum.

Het spectrum voor kleine hoeken ($2\theta < 40^\circ$) is als volgt:



We zien dus dat er in dit gebied vijf lijnen optreden. Deze kunnen we toewijzen aan de (110)-, de (101)-, de (111)-, de (200)- en de (210)-vlakken. Het samenvallen van de reflecties voor de (111)- en de (200)-vlakken is louter toevallig. Merken we daarbij ook nog op dat de amplitude van de magnetische verstrooiing nul is voor het (001) vlak loodrecht op de c -as. Daar deze amplitude afhangt van de hoek tussen het magnetisch moment en het reflecterende vlak, betekent dit dat deze magnetische momenten gericht zijn volgens de c -as. Dit werd weergegeven op de (eerste) figuur van vorige bladzijde. We kunnen dit ook anders verwoorden. Vanwege de specifieke symmetrie van het kristalrooster is de (100)- en de (001)-reflectie verboden, daar deze gecompenseerd worden door de reflecties van respectievelijk de (200)- en de (002)-vlakken (denk aan de figuur van de Bragg reflectie, bij de beschrijving van de opbouw van het spectrum - vorige paragraaf). Op deze wijze zijn de eerste (h00)- en (00h)-reflecties, die we kunnen waarnemen in het diffractiespectrum de (200)- en de (002)-lijnen. Wanneer nu het (200)-netvlak (en dus ook het (002)-netvlak) vanwege de magnetische bijdrage niet meer equivalent is aan het (100)-netvlak (resp het (001)-netvlak), dan komt de (100)- en (001)-reflectie te voorschijn als een louter magnetische bijdrage. De magnetische en de kristallografische roosters vallen dus samen. Het centraal Mn-ion heeft echter een andere spinrichting.

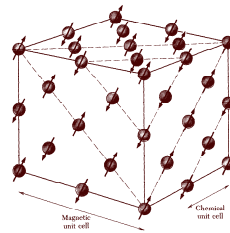
Zetten we de intensiteit uit in functie van de temperatuur, voor het (100) vlak, dan bekomen we een magnetische kromme:



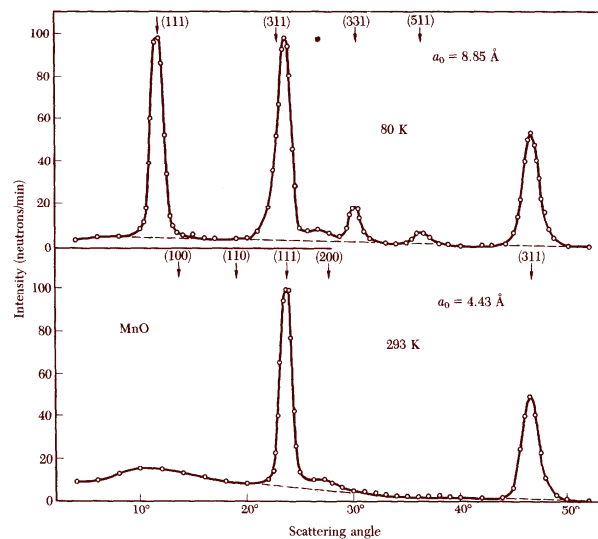
Het verloop komt overeen met de Brillouin kromme, voor $S = 5/2$. Dit verloop kan men bijvoorbeeld gebruiken om de Néeltemperatuur te bepalen.

1.3.2 Mangaanoxide

We beschouwen opnieuw mangaanoxide (of analoog: FeO, CoO, NiO). Deze bezit een fcc structuur:



Het neutronen diffractiepatroon is als volgt:

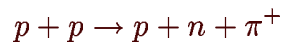


Het onderste spectrum werd opgenomen bij kamertemperatuur. Dit is boven de Néeltemperatuur (118K). We zien bij lage hoeken twee duidelijke pieken, typisch voor een fcc structuur: de (111) en (311) reflecties. Daarnaast is er nog een kleine (200) bijdrage terug te vinden. Hernemen we het spectrum bij een temperatuur onder de Néeltemperatuur dan vinden we een $(1/2 \ 1/2 \ 1/2)$ piek. Deze komt overeen met de (111) piek voor de magnetische eenheidscel. Analoog kan in de verbreding van de kristallografische (111)-reflectie de magnetische (311)-bijdrage opgemerkt worden. Het spectrum bij 80K geeft dus aanleiding tot een kubische eenheidscel met een roosterconstante van 8.85\AA en deze bij 293K tot een kubische eenheidscel met een roosterconstante van 4.43\AA . Bepalen we het spectrum door middel van X-stralen, dan vinden we echter voor beide temperaturen een roosterconstante van 4.43\AA . Hieruit volgt duidelijk dat de magnetische ordening volgens de (111) vlakken gebeurt en dat de magnetische eenheidscel het dubbele is van de kristallografische. De kleine piek nabij een Bragg-hoek van ongeveer 5° is te wijten aan residuele short-range magnetische ordening.

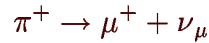
2 Muon spin rotatie

2.1 Principe

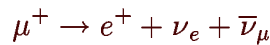
Muonen behoren tot de familie der leptonen. Er bestaan positieve muonen μ^+ en negatieve muonen μ^- . Daar -zoals we later zullen zien- muonen gebruikt worden voor het bepalen van magnetische velden moeten deze zich in de interstitiële roostersites plaatsen. Daarom zal er vooral gebruik wordt gemaakt van de positieve muonen en we beperken ons hier tot deze⁹. Ze worden verkregen door het verval van pionen, die op hun beurt verkregen worden door een nucleaire p-p reactie bij $E_p \geq 600\text{MeV}$:



De pionen π^+ hebben een gemiddelde levensduur van $\tau = 26\text{ns}$ en vallen uiteen in een positief muon en een μ -neutrino:

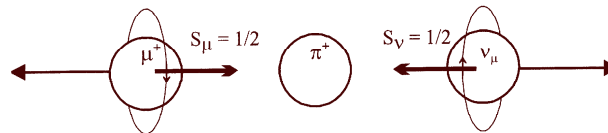


Het gevormde muon vervalt op zijn beurt naar een positron en 2 neutrino's:



Positieve muonen zijn zware anti-elektronen ($m = 207m_e$), met spin $1/2$. Hun gemiddelde levensduur bedraagt $2.2\mu\text{s}$. Deze is dus een 100-tal keer groter dan die van het pion en we mogen het verval van het pion dus als ogenblikkelijk beschouwen.

Stellen we het pion verval voor door middel van volgende figuur



dan zien we dat de op deze manier verkregen muonen 100% spin gepolariseerd zijn. Het pion heeft namelijk spin 0, het muon en het neutrino hebben spin $1/2$. Houden we echter rekening met de heliceiteit (het massaloos¹⁰ neutrino heeft een heliceiteit -1) dan zien we dat het behoud van draaimoment vereist dat de spin van het muon antiparallel moet zijn ten opzichte van zijn moment.

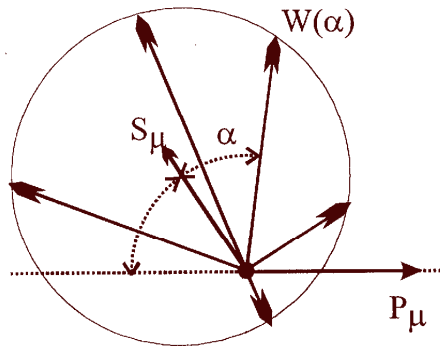
⁹ Het negatief muon gedraagt zich als een zeer zwaar elektron en wordt door het atoom gevangen in een Bohr baan die dicht bij de kern ligt dan voor de elektronen.

¹⁰ We gaan daar voorlopig nog van uit.

Een tweede belangrijk aspect is de anisotropie van het verval



De gevormde positronen worden namelijk vooral uitgezonden in de richting van de spin. Meten we dus de richting waarin de meeste positronen worden uitgezonden, dan volgt hieruit de richting van de muon spin. Volgende figuur geeft dit weer.



De hoekverdeling is

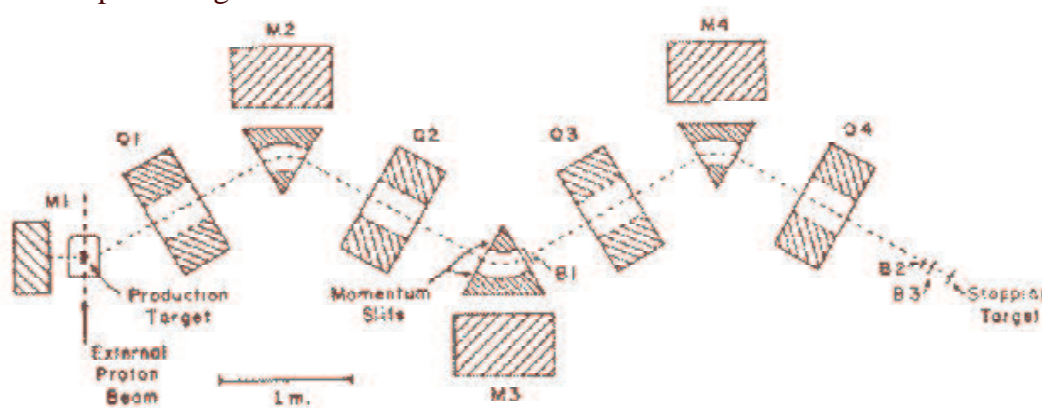
$$W(\alpha) = 1 + A \cos \alpha$$

met $A = 1/3$. De uiterste waarden $W = 4/3$ en $W = 2/3$ worden bekomen voor respectievelijk $\alpha = 0$ en $\alpha = \pi$. De waarschijnlijkheid dat het positron dus uitgezonden wordt in de richting van \mathbf{S}_μ is dus twee maal zo groot als in de tegengestelde richting.

Merken we tenslotte nog op dat wanneer het muon binnendringt in het te onderzoeken specimen, de eventuele overschot aan kinetische energie verloren gaat door botsingen met de atomen tot wanneer het muon nog slechts thermische energie heeft. Tijdens dit afremmingsproces blijft de spinoriëntatie van het muon behouden.

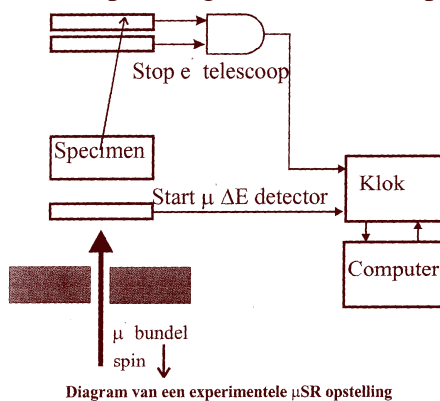
2.2 Het spectrum

Zoals in voorgaande paragraaf besproken zijn de muonen in het pion referentiestelsel 100% gepolariseerd. Gebruikt men dus muonen verkregen van pionen in rust, dan bekomt men een straal volledig (antiparallel) gepolariseerde muonen. Men spreekt in dit geval van een *Arizona beam*, naar de groep die dit procédé voor de eerste keer gebruikte. Een primaire protonstraal laat men invallen op een Be trefplaatje. Dit plaatje is meerdere centimeters lang zodat we enkel muonen verkrijgen die gevormd worden door een verval van pionen nabij het oppervlak. Deze bundel van oppervlak muonen wordt dan door middel van kwadrupool lenzen en afbuigmagneten naar het te onderzoeken specimen geleid.



Op deze manier kan een muon straal van ongeveer 10^6 tot $10^7 \mu^+$ /s verkregen worden.

Volgende figuur geeft schematisch de opstelling weer voor het opnemen van een μ SR spectrum:



De muon bundel wordt eerst door een scintillatie detector gestuurd waardoor hij een kleine fractie van zijn energie verliest en een start signaal geeft. De muonen komen nu in het specimen terecht waar ze vervallen tot positronen die dan gedetecteerd worden. Hiervoor maakt men gebruik van 2 opeenvolgende scintillatie detectoren. Wordt in de beide detectoren een muon gedetecteerd dan heeft men een stop signaal.

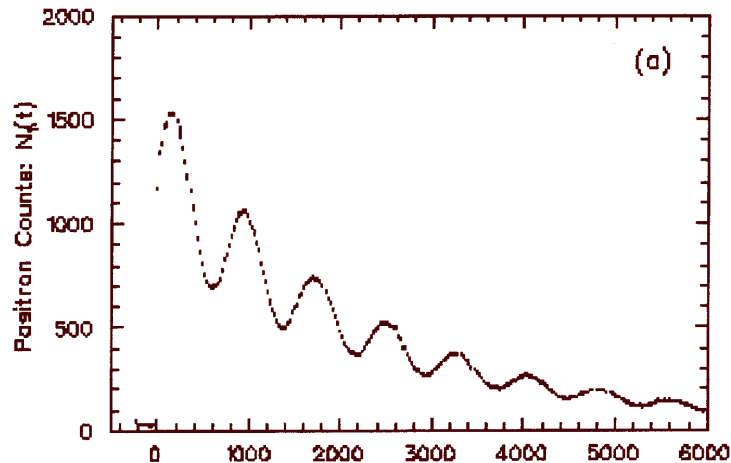
Men meet dus met een klok het tijdsverschil tussen de waarneming van het positieve muon en het positron. Het spectrum dat men op deze manier bekomt noemt men een *levensduurspectrum*. Is er geen magnetisch veld dan verkrijgen we een exponentieel verval met vervalconstante $\lambda = 1/\tau$. De waarde van τ bedraagt (zoals reeds eerder vermeld) ongeveer $2,2 \cdot 10^{-6}$ s. Is er echter ter hoogte van het muon een magnetisch veld dan zal dit muon een precessiebeweging uitvoeren omheen de richting van dit veld. De frekwentie van deze precessie wordt gegeven door de Larmorfrequentie:

$$\nu_L = \frac{\gamma}{2\pi} B_\mu$$

Hierdoor wordt het levensduurspectrum gemoduleerd door een cosinusfunctie met dezelfde frequentie en het waargenomen spectrum vertoont dus volgend verloop

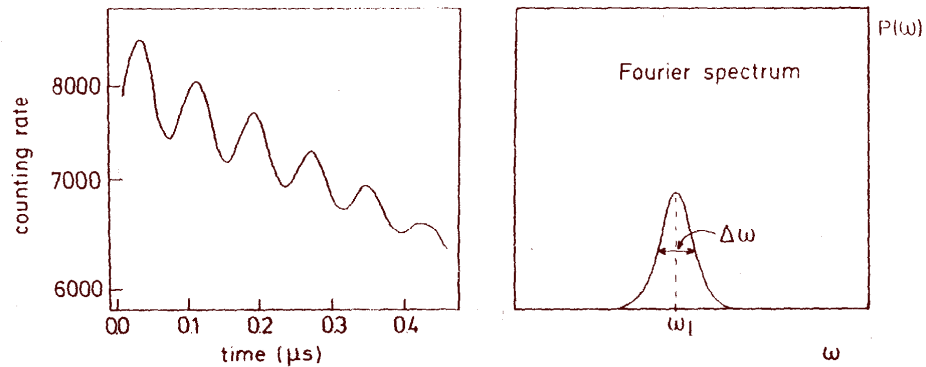
$$N(t) = N_0 e^{-t/\tau} [1 + P(t) A \cos(\varphi - 2\pi\nu_L t)] + B$$

met φ de initiële hoek tussen de polarisatie en de waarnemingsrichting van de positronteleskoop. Daar we hier werken met 100% gepolariseerde muonen is φ ongeveer 180° daar de positronen preferentieel uitgezonden worden in een richting tegengesteld aan de oorspronkelijke μ -bundel. Door uitmiddeling over alle mogelijke positronenergieën is $A = 1/3$ en $P(t)$ is een functie die het tijdsafhankelijke verlies aan polarisatie voorstelt. Volgende figuur geeft een experimenteel μ SR spectrum.



We zien dus dat er op de exponentiële afname een oscillatie gesuperponeerd is. Door een fitting van dit verloop met de opgestelde formule, kunnen dan de afzonderlijke experimentele parameters bepaald worden.

Probleem is echter dat de verschillende muonen elk onder invloed van een ander magnetisch veld kunnen staan. Hierdoor zullen er meerdere frekwenties optreden. Voor elke frekwentie is er andere $P_i(t)$ en $A_i(t)$. De oplossing bestaat er in een fourier transformatie uit te voeren waardoor we volgende figuur krijgen:



Time differential and Fourier transform μ SR spectrum (schematic).

Hieruit kan men dan afleiden welke frekwenties er optreden. Ook kan uit de verhouding van de oppervlakken onder de pieken, de verhouding van de coëfficiënten A_i bepaald worden (met $\sum_i A_i = A$).

2.3 Toepassing

2.3.1 Inleiding

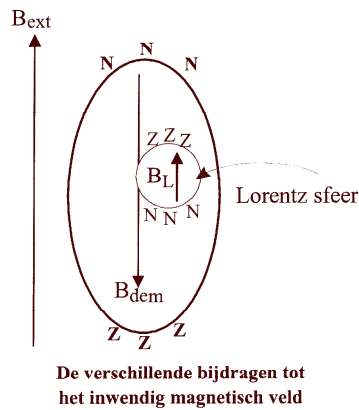
Wanneer in de omgeving van het μ^+ een magnetisch veld heerst, zal de spin van dit muon een precessiebeweging rond het magnetisch veld uitvoeren, met als frekwentie:

$$\nu_L = \frac{\gamma}{2\pi} B_\mu$$

de Larmorfrequentie. De factor γ is de gyromagnetische verhouding ($\boldsymbol{\mu}_\mu = \gamma \frac{e}{2m_\mu} \mathbf{S}$). Door het bepalen van deze frekwentie is men dus met behulp van μSR in staat om de inwendige \mathbf{B} velden in magnetische materialen te detecteren. Voor een *ferromagnetisch* materiaal bestaat dit inwendig veld uit volgende componenten:

$$\mathbf{B}_\mu = \mathbf{B}_{ext} + \mathbf{B}_{dem} + \mathbf{B}_L + \mathbf{B}_{dip} + \mathbf{B}_{fermi}$$

De eerste term is het uitwendig veld, de tweede term is het demagnetiserend veld dat ontstaat door de vrije polen aan het oppervlak. Deze laatste term is afhankelijk van de vorm van het specimen. Is dit bijvoorbeeld sferisch, dan kan aangetoond worden dat $\mathbf{B}_{dem} = \frac{-1}{3} \mu_0 \mathbf{M}$, met \mathbf{M} de macroscopische magnetisatie en μ_0 de permeabiliteit van het vacuum. De derde term, het Lorentz veld, is het veld dat in een hypothetische sferische holte wordt gecreëerd door de magnetische momenten die buiten de Lorentz sfeer liggen. Dit veld is evenredig met de saturatie magnetisatie: $\mathbf{B}_L = \frac{-1}{3} \mu_0 \mathbf{M}_s$. Volgende figuur geeft een overzicht van deze eerste drie bijdragen.



Het dipolair veld \mathbf{B}_{dip} is het veld dat door de dipool-dipool interacties binnen de Lorentz sfeer veroorzaakt wordt. Het is dus een klassieke grootte en wordt gegeven door

$$\mathbf{B}_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_j \frac{3(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{r}_j) \mathbf{r}_j - r_j^2 \boldsymbol{\mu}_j}{r_j^5}$$

met $\boldsymbol{\mu}_j$ de het dipoolmoment van het roosteratoom j en \mathbf{r}_j de positie van dit atoom ten opzichte van het muon. De sommatie gebeurt over de ganse sfeer, maar zal snel convergeren of door symmetrie sterk vereenvoudigd worden. Het fermi contact veld \mathbf{B}_{fermi} tenslotte wordt veroorzaakt door de polarisatie van de conductie elektronen. Het is een hyperfijn veld ten gevolge van de fermi contact interacties van het muon met de geleidingselektronen. De grootte ervan is evenredig met de elektronspindichtheid ρ_{spin} ter hoogte van het muon (positie 0):

$$B_{fermi} = \frac{-2\mu_0}{3} \mu_e \rho_{spin}(0)$$

μ_e is het magnetisch moment van het elektron.

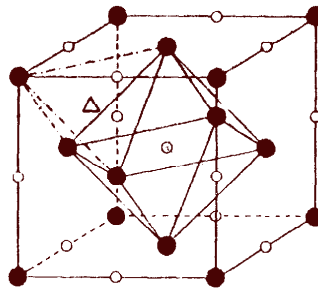
De meeste μ SR experimenten worden uitgevoerd zonder uitwendig veld en bij gedemagnetiseerde specimens. Hierdoor is dus $B_{ext} = 0$ en $B_{dem} = 0$ ($M = 0$) waardoor enkel nog

$$\mathbf{B}_\mu = \mathbf{B}_L + \mathbf{B}_{dip} + \mathbf{B}_{fermi}$$

overblijft.

2.3.2 Voorbeeld: nikkel

Nikkel bezit een fcc structuur en de interstitiële sites zijn dus tetrahedraal en octahedraal:

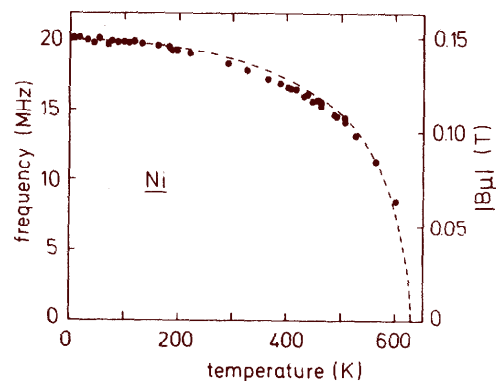


Unit cell of the face-centered cubic (fcc) lattice. The full circles indicate the lattice positions; the open circles are the octahedral interstitial sites. In the upper front corner a tetrahedral site is indicated (open triangle).

Voor koper, dat tevens de fcc structuur bezit, heeft men kunnen aantonen dat het muon zich in de octahedrale sites zal plaatsen. Men neemt aan dat dit ook zo is voor een muon in nikkel. Ten gevolge van de kubische symmetrie is in deze sites het dipoolveld echter gelijk aan nul en het lokale veld voor het muon wordt dus gegeven door

$$\mathbf{B}_\mu = \mathbf{B}_L + \mathbf{B}_{fermi}$$

Meerdere μ SR experimenten uitgevoerd bij verschillende temperaturen leveren een volgend verband op tussen de frekwentie en de temperatuur:



Temperature dependence of the muon spin precession in nickel. The dashed line gives the temperature dependence of the magnetization normalized to the muon value at $T = 0$ K

Daar de frekwentie evenredig is met \mathbf{B}_μ , die op zijn beurt evenredig is met de spontane magnetisatie geeft dit verloop dus het kwalitatief verband tussen de *macroscopische* (spontane) magnetisatie en de temperatuur!

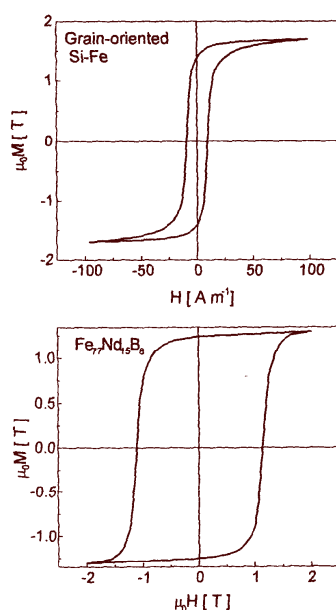
Bemerk tenslotte nog dat met behulp van deze methode het fermi contact veld kan bepaald worden. Daar $B_L = +0.221\text{T}$ (Denison et al, 1979) en $B_\mu = +0.149\text{T}$ (extrapolatie van de meetcurve, naar $T = 0$) geeft dit $B_{fermi} = -0.072\text{T}$. Het Lorentzveld en het Fermi contact veld zijn hier dus antiparallel. Het (positief) teken van B_μ kan bepaald worden door μSR uit te voeren in een extern veld. Als, na dat magnetisatie bereikt is, de frequentie ν_μ toeneemt voor toenemende veldgrootte betekent dit dat B_{ext} , M_s en B_μ parallel zijn.

Hoofdstuk IV

Enkele toepassingen

1 Harde en zachte ferromagneten

Men onderscheidt twee verschillende types ferromagneten: harde en zachte ferromagneten. Onderscheid tussen beide wordt gemaakt op basis van hun hysteresiskromme.



Top: Grain-oriented 3 wt% Si-Fe alloy of the type used in transformer cores.
Bottom: Sintered aligned $\text{Fe}_{77}\text{Nd}_{13}\text{B}_8$ permanent magnet
Loop widths differ by a factor of the order of 10^5 .

Zachte ferromagneten hebben een smalle lus. Ze worden gekenmerkt door een kleine remanente inductie en een laag koërcitief veld. Doordat ze een smalle hysteresislus hebben, zullen de hysteresisverliezen klein zijn.

Totaal elektrisch verlies van verschillende magnetische materialen met een foliedikte van 0,2 tot 0,5 mm bij een frequentie van 50 Hz en een inductie-amplitude van 1 T

| Materiaal | Totaal verlies W_{tot} (W/kg) |
|---------------------------------------|------------------------------------|
| Commercieel ijzer | 5 - 10 |
| Si-Fe heet gerold | 1 - 3 |
| Si-Fe koud gerold, korrelgeoriënteerd | 0,3 - 0,6 |
| 50% Ni-Fe | 0,2 |
| 60% Ni-Fe | 0,06 |

De in deze tabel opgenomen totaal elektrisch verlies wordt als volgt gedefinieerd:

$$W_{\text{tot}} = W_{\text{H}} + W_{\text{ec}} + W_{\text{a}}$$

met W_{H} de hysteresisverliezen, W_{ec} de verliezen ten gevolge van de foucaultstromen ('eddy currents') en W_{a} de extra verliezen o.a. ten gevolge van magnetische nawerkingen: het anomaal verlies. De zachte ferromagneten zijn dus uitermate geschikt voor cyclische processen zoals bijvoorbeeld voor transformatoren. Om de magnetisatie gemakkelijk van richting te kunnen veranderen is het dus van groot belang dat de domeinwanden gemakkelijk kunnen verplaatsen, zodat een kleine toename van het uitwendig veld een grote toename van de magnetisatie tot gevolg heeft. Dit betekent dat er weinig onzuiverheden in het materiaal mogen aanwezig zijn. Om het aantal dislocaties te verminderen kan men gebruik maken van 'annealing'. Hierbij gaat men eerst het specimen opwarmen tot een temperatuur waarbij de atomen vrij gemakkelijk naar de juiste plaats kunnen migreren, waarna men langzaam afkoelt. Tot de zachte ferromagnetische materialen horen bijvoorbeeld gewoon ijzer en silicium ijzer (tot 4% Si). Door het toevoegen van silicium zal de elektrische weerstand namelijk toenemen waardoor de verliesstromen beperkt worden. De grootte van de saturatie magnetisatie blijft grotendeels behouden.

Overzicht van enkele zacht-magnetische legeringen en hun karakteristieken.

| | Samenstelling | μ_i | μ_{max} | H_c | B_s |
|--------------------------|-----------------------------|---------|--------------------|-------|-------|
| ijzer | 100% Fe | 150 | 5000 | 80 | 2,15 |
| Si-Fe (n-georiënt) | 96% Fe 4% Si | 500 | 7000 | 40 | 1,97 |
| Si-Fe (korrel-georiënt.) | 97% Fe 3% Si | 1500 | 40000 | 8 | 2,0 |
| 78 Permalloy | 78% Fe 22% Ni | 8000 | 100000 | 4 | 1,08 |
| Hipernik | 50% Fe 50% Ni | 4000 | 70000 | 4 | 1,60 |
| Supermalloy | 79% Ni 16% Fe 5% Mo | 100000 | 1000000 | 0,16 | 0,79 |
| Mumetal | 77%Ni 16% Fe 5% Cu 2% Cr | 20000 | 100000 | 4 | 0,65 |
| Permendur | 50% Co 50% Fe | 800 | 5000 | 160 | 2,45 |
| Hiperco | 64% Fe 35% Co 0,5% Cr | 650 | 10000 | 80 | 2,42 |
| Supermendur | 49% Fe 49% Co 2% V | | 60000 | 16 | 2,40 |

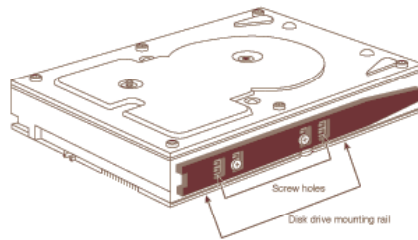
Harde ferromagneten vertonen een brede lus en dus een grote remanente inductie en hoog koërciatief veld. Hun voornaamste toepassing is als permanente magneten en voor magnetische opslag van gegevens (video,...). Bij dit materiaal moet men er dus voor zorgen dat de magnetische domeinwanden zo lang mogelijk op hun plaats blijven (wanneer het veld verwijderd is, willen we de magnetisatie zo lang mogelijk behouden). Zoals hiervoor reeds vermeld, kan dit door er voor te zorgen dat het materiaal een onregelmatige roosterstructuur heeft. Hiervoor kan men gebruik maken van 'quenching': na het opwarmen wordt het materiaal afgeschrikt door onderdompeling in koud water of olie. Een voorbeeld van harde ferromagnetische materialen zijn bijvoorbeeld de Alnico legeringen. Deze zijn samengesteld uit verschillende hoeveelheden Fe, Al, Co en Cu.

Enkele permanent-magneetmaterialen en hun magnetische waarden

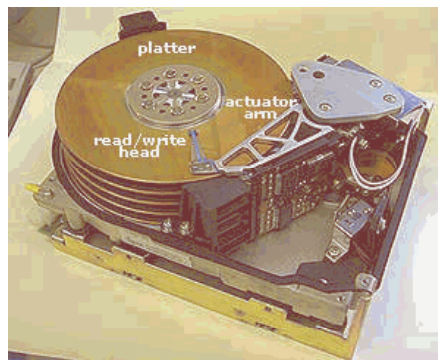
| Materiaal | Samenstelling (overschot Fe) | M_r (T) | H_c (kA/m) | $(BH)_{max}$ (kJ/m ³) |
|----------------------|-------------------------------------|--------------|-----------------|--------------------------------------|
| Staal | 1% C | 0,9 | 4 | 1,59 |
| 36Co-staal | 36%Co 3,75%W 5,75%Cr 0,8%C | 0,96 | 18,3 | 7,42 |
| Alnico 1 | 12%Al 20%Ni 5%Co | 0,72 | 35 | 11,1 |
| Alnico 2 | 10%Al 17%Ni 2,5%Co 6%Cu | 0,72 | 44 | 12,7 |
| Alnico 4 | 12%Al 28%Ni 5%Co | 0,55 | 56 | 10,3 |
| Alnico 5 | 8%Al 14%Ni 24%Co 3%Cu | 1,25 | 44 | 35,8 |
| Alnico 6 | 8%Al 15%Ni 24%Co 3%Cu 1%Ti | 1,0 | 60 | 27,9 |
| Alnico 12 | 6%Al 18%Ni 35%Co 8%Ti | 0,58 | 76 | 4,0 |
| Cunico | 50%Cu 21%Ni 29%Co | 0,34 | 53 | 6,4 |
| Bariumferriet | BaO.6Fe ₂ O ₃ | 0,395 | 192 | 28 |
| PtCo | 77%Pt 23%Co | 0,645 | 344 | 76 |
| Remalloy | 12%Co 17%Mo | 1,0 | 18,4 | 9 |
| Vicalloy 1 | 10%V 52%Co | 0,88 | 24 | 7,9 |
| Vicalloy 2 | 14%V 52%Co | 1,0 | 36 | 24 |
| Samarium-cobalt | SmCo ₅ | 0,9 | 696 | 160 |
| Neodymium-ijzer-boor | Nd ₂ Fe ₁₄ B | 1,3 | 1120 | 330 |

2 Hard Disk

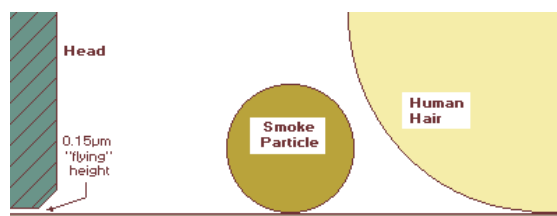
2.1 Opbouw



Een hard disk bevat een aantal ronde schijven, boven elkaar geplaatst. Deze platen bestaan uit een magnetisch medium op een hard¹¹ niet-magnetisch substraat. De magnetische laag bevindt zich aan beide zijden en wordt op het substraat gebracht via een dunne laag technologie. De schijven kunnen gemaakt worden uit een aluminium legering of een keramisch materiaal. Met het oog op weerstand tegen warmte geleiding verkiest men meestal de laatste. Ook de dikte is kleiner dan voor de aluminium substraten. Tussen de snel ronddraaiende schijven is er ruimte voorzien voor de lees/schrijf koppen.



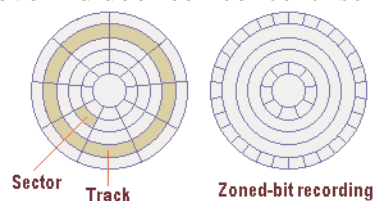
Deze lees- en/of schrijfkoppen bevinden zich op zeer korte afstand van de platen. Begin de jaren '80 bedroeg deze nog $2.5 \mu\text{m}$, nu is dit nog slechts $0.15 \mu\text{m}$ (Fujitsu).



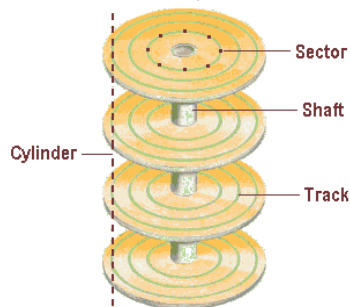
¹¹ Vandaar de term 'hard disk'.

Hoe kleiner deze afstand, hoe minder storing er kan ontstaan bij het overbrengen van de data en hoe hoger de data-dichtheid dus kan zijn. Ook de frekventies nemen toe. Daar echter het minste vuil de werking zou kunnen verstoren, wordt het geheel hermetisch afgesloten (het openen van een hard disk is dus niet aan te raden ...). Komt de kop in contact met de draaiende schijven (bijvoorbeeld door een stof deeltje of door een -mechanische- schok), dan kan er data verloren gaan, schade ontstaan aan de oppervlakte laag of aan de kop: een 'crash'. Een speciale coating biedt hiertegen enige bescherming.

De schijven worden door een fysische of '*low level format*' onderverdeeld in 'tracks' en sectoren. De (duizende) '*tracks*' worden gevormd door een concentrische verdeling van de schijf-ven:



'Tracks' die zich (fysisch) boven elkaar bevinden, vormen de *cilinders* van de hard disk:



Een cilinder is dus dát deel van de hard disk dat door de schrijf/lees koppen kan bereikt worden zonder deze te verplaatsen. Elke cilinder wordt dan nog onderverdeeld in *sectoren* van elk 512 bytes. Een sector is dus de kleinste 'lees/schrijf eenheid' van een hard disk. Deze sectoren worden genummerd, beginnend vanaf 1 (in tegenstelling tot de cilinders of koppen waarbij men begint vanaf 0). Zo bezit bijvoorbeeld een floppy 80 cilinders, (genummerd 0 tot en met 79) en twee koppen (genummerd 0 en 1). Elke 'track' van de floppy heeft 18 sectoren (genummerd 1 tot met 18). Door het formatteren wordt dus de nummering van de sectoren bepaald. Deze nummering wordt in het begin en op het einde van elke sector 'ingeschreven'. Vandaar het verschil in opslagcapaciteit voor een geformatteerde ten opzichte van niet-geformatteerde disk (tussen de 'tracks' wordt ook nog enige plaats overgelaten).

Willen we meerdere operating systems installeren, dan moet er een *partitionering* gebeuren. Hierdoor kunnen er verschillende file systems ('file allocation table': FAT) gebruikt worden, met elk hun eigen methode om file ruimte toe te kennen aan de logische eenheden: 'clusters' of 'allocation units'. Zo kan het FAT gebruikt door DOS file names met een lengte van maximaal 11 karakters verwerken, en die door Windows 9x een lengte van maximaal 255 karakters. Door middel van 12 of 16 bit getallen worden dan de clusters vastgelegd, zodat het maximum volume 2G bedraagt. Per hard disk kunnen er slechts twee fysische FAT partities gebruikt worden: de 'primary' en de 'extended'. Deze laatste kan echter in 25 logische volumes¹² verdeeld worden. Maken we gebruik van een FAT32 file system, dan worden er 32-bit getallen gebruikt om de clusters aan te duiden. Het maximum volume bedraagt dan 2T.

Een laatste stap is de '*high-level format*'. Hierbij wordt de structuur opgelegd die gebruikt zal worden voor het verwerken van de data. Men kan dit dus eerder beschouwen als een inhoudsopgave. FAT partities hebben een volume boot sector (VBS), twee copies van een FAT en een root directory per geformatteerde logische drive.

Het 'format' commando van DOS of W9x kan zowel een low als een high level formatting uitvoeren voor een floppy. Voor een hard disk wordt enkel een high level uitgevoerd daar de low level voor een IDE of SCSI hard disk uitgevoerd wordt door de fabrikant. Nog een belangrijke opmerking. Door middel van een speciale techniek ('zone bit recording') bevatten de 'tracks' die zich verder van het centrum bevinden meer sectoren. Hierdoor kan er 20 tot 50% meer data opgeslagen worden. Daar de BIOS slechts kan werken met een vast aantal sectoren per 'track' voor de volledige disk drive, komen de setup parameters van een hard disk (die moeten ingeladen worden in de BIOS) meestal niet overeen met de werkelijke verdeling van de hard disk.

Qua formaat kan men voor een gewone PC twee soorten hard disks onderscheiden naargelang hun diameter: 3.5" en 5.25".¹³ Hoe groter de schijven, hoe meer data ze kunnen bevatten. Ze zijn echter meer schokgevoelig en vereisen krachtigere motoren om ze rond te draaien. Maar nog belangrijker: ze hebben een lagere efficiëntie daar de data over een groter gebied verspreid is.

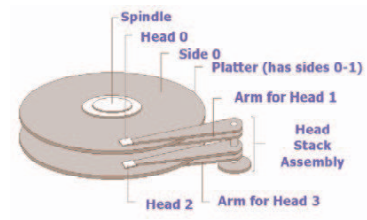
¹² Elk deel van de disk dat door het operating system wordt aangeduid met een letter of naam, noemt men een 'volume' of 'logical drive'.

¹³ Voor een laptop is dit 2.5" tot soms zelf 1".

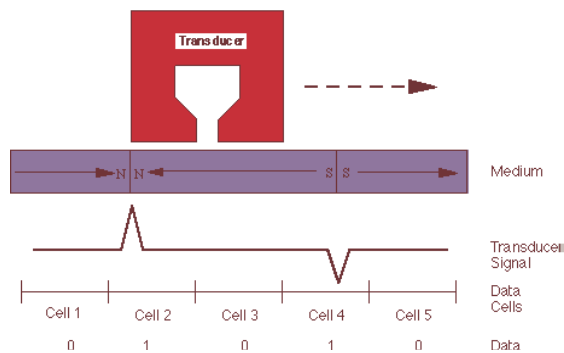
2.2 Werking

2.2.1 Data opslag

Data wordt opgeslagen door middel van de koppen die op korte afstand boven de ronddraaiende schijven zweven.



We leggen het basisprincipe uit met behulp van volgende figuur:



Vloeit er stroom doorheen de windingen, dan ontstaat er een magnetisch veld waardoor de magnetische domeinen in de 'track' geöriënteerd worden¹⁴ en de data dus weggeschreven wordt. Anderzijds wordt er bij het lezen een stroom geïnduceerd in de windingen wanneer de kop een fluxvariatie ondervindt. Met andere woorden, het is dus niet de richting van het magnetisch veld van de domeinen dat de informatie bevat maar wel ervan. Wanneer de polariteit van teken omwisselt, hebben we een '1'. Onderstaande figuur toont het (magnetisch) oppervlak van een hard disk waarbij de weggeschreven bits duidelijk te zien zijn:

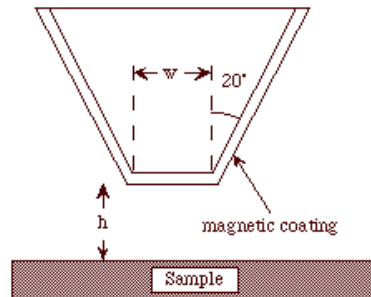


Een dergelijke figuur kan verkregen worden met behulp van MFM: een experimentele techniek, kort beschreven in volgende paragraaf.

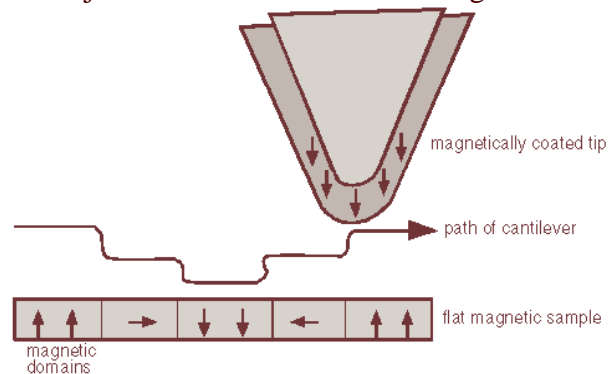
¹⁴ Daar een magnetisch veld gemakkelijker door een geleider dan door lucht gaat, zal dit veld naar buiten toe gericht zijn en kan er dus een magnetisatie van het onderliggend materiaal verkregen worden.

2.2.2 Magnetic Force Microscopy: MFM

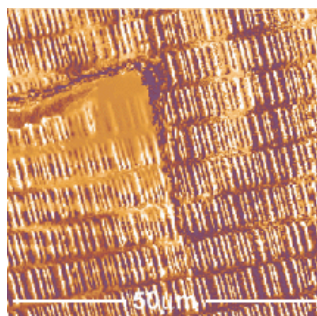
Beschouw volgende opstelling:



Laat men een dergelijke 'cantilever' over het materiaal bewegen, dan zal deze een verticale verplaatsing ondergaan, afhankelijk van de oriëntatie van de magnetische domeinen van het staal:

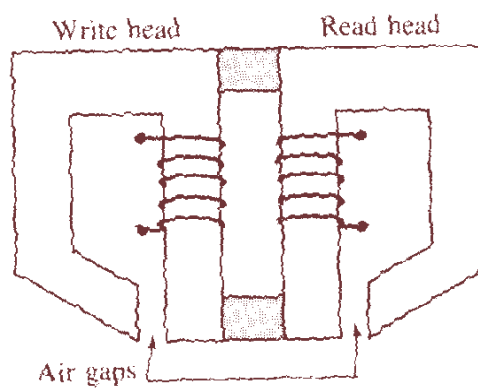
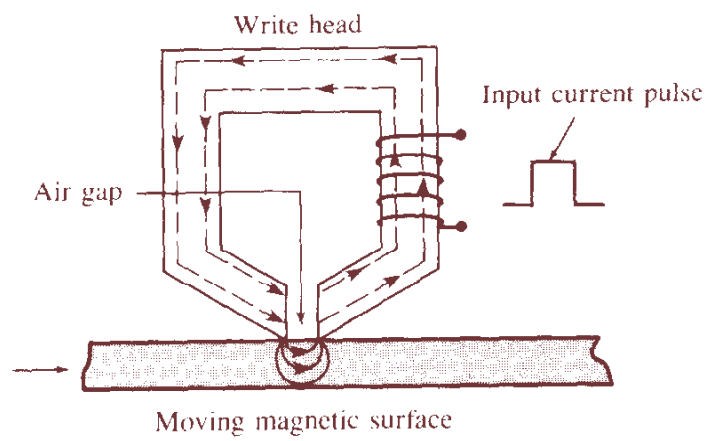
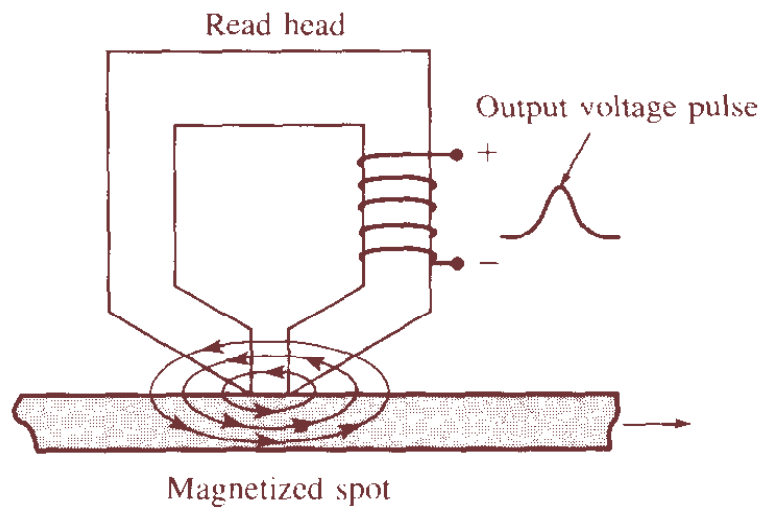


Om de oppervlakte effecten weg te werken kan men de meetteip twee maal over het te onderzoeken materiaal laten bewegen. De eerste maal werkt men heel dicht bij het oppervlak waardoor men de topologische informatie verkrijgt die dan in rekening kan gebracht worden voor de tweede meting, waarbij men op grotere afstand werkt (typisch 50-150nm). Met behulp van MFM is men bijvoorbeeld in staat de schade aan de magnetische informatie weer te geven die ontstaat door een head-crash:



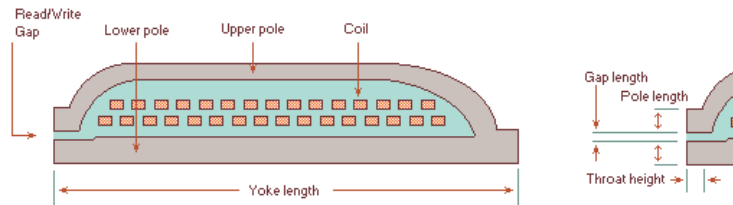
Hiermee kan men dan onder andere nagaan of de informatie nog kan gerecupereerd worden.

2.3 De lees/schrijfkoppen



2.3.3 Dunne film koppen (TF)

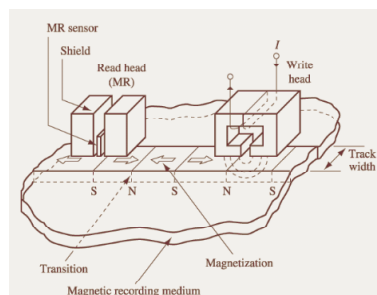
Zoals blijkt uit hun naam worden deze koppen vervaardigd door middel van een dunne film technologie (zoals bijvoorbeeld fotolithografie).



Ze kunnen gebruikt worden voor schrijven met een dichtheid van 100-1000MB en hebben een kleinere vlieghoogte (=de afstand van de kop ten opzichte van de hard disk zelf) dan de vorige twee. Ze worden meer en meer vervangen door één van de volgende koppen:

2.3.4 Magnetoresistieve koppen (MR)

Begin de jaren '90 introduceerde IBM een techniek waarbij gewerkt wordt met twee verschillende koppen: één voor het schrijven en één voor het lezen.



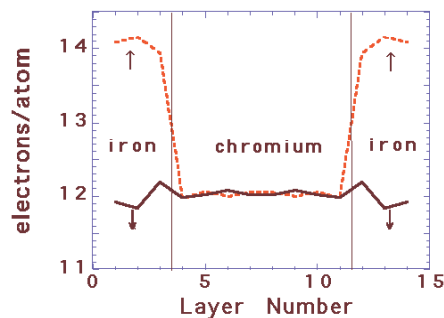
Het schrijven gebeurt door stroom te sturen door een inductief element, net zoals voorheen¹⁵. Voor het lezen maakt men echter gebruik van een magnetoresistieve sensor. Afhankelijk van het magnetisch veld vertoont dit element een andere weerstand. De weerstandsverandering kan dan worden omgezet in een spanningsvariatie. Het voordeel van een dergelijke techniek waarbij men twee koppen gebruikt is dat men afzonderlijk het lees- en schrijfproces kan optimaliseren. Voor een lees- én schrijfkop zal een toename van de lees efficiëntie meestal resulteren in een afname van de schrijf efficiëntie en vice versa. Verhogen we bijvoorbeeld het aantal windingen, dan zal leesgevoeligheid toenemen, het schrijven bij hoge snelheid wordt echter moeilijker. De MR sensoren hebben ook een grotere gevoeligheid waardoor er kleinere magnetische domeinen kunnen gebruikt worden. Daardoor kan men de bits op de schijven dichter bij elkaar schrijven, wat resulteert in een grotere capaciteit van de hard disk.

¹⁵ Men gaat meestal gebruik maken van een TF kop voor het schrijven.

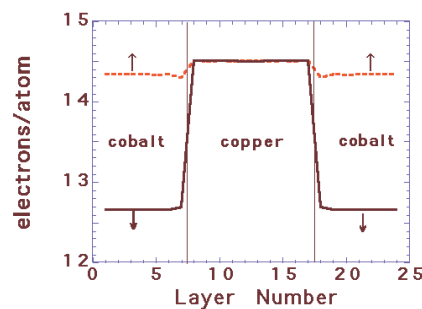
2.3.5 'Giant Magnetoresistive' koppen (GMR)

1. Het GMR effect

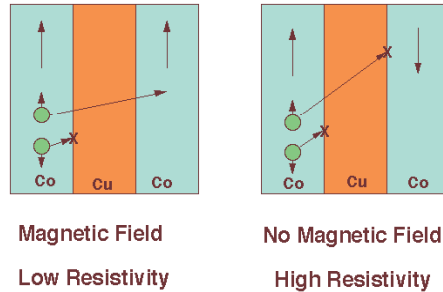
Het '*giant magnetoresistance*' effect werd eind de jaren '80 ontdekt door twee (onafhankelijk werkende) Europese fysici: Peter Gruenberger (KFA Research Institute, Duitsland) en Albert Fert (Université de Paris-Sud, Frankrijk). Bij bepaalde zeer dunne, elkaar afwisselende lagen van verschillende metallische elementen werden zeer grote weerstandsveranderingen opgemerkt, afhankelijk van de magnetisatie-richting van de afzonderlijke lagen. Dit wordt veroorzaakt door de spin-afhankelijke verstrooiing van de elektronen: elektronen met spin up worden anders verstrooid dan deze met spin down. We verduidelijken dit aan de hand van volgend voorbeeld: een afwisselend ijzer/chroom systeem (analoog aan dat van professor Fert). Een berekening (uitgevoerd door Butler, Zhang en Nicholson) geeft volgend resultaat voor het aantal spin up en spin down elektronen per atoom:



We zien dat het aantal spin down elektronen voor de beide drie lagen ongeveer gelijk is. Wanneer deze dus van de ijzer naar de chroom laag bewegen, zien ze bijna geen verschil tussen het aantal elektronen per atoom. Voor hen is het rooster als het ware bijna onveranderd en ze worden dan ook bijna niet verstrooid. Dit geldt echter niet voor het aantal spin up elektronen, vandaar het belang van de tussenlaag (die er tevens voor zorgt dat er geen magnetische koppeling tussen de beide lagen is). Voor een kobalt/koper systeem werd juist het omgekeerde gevonden:



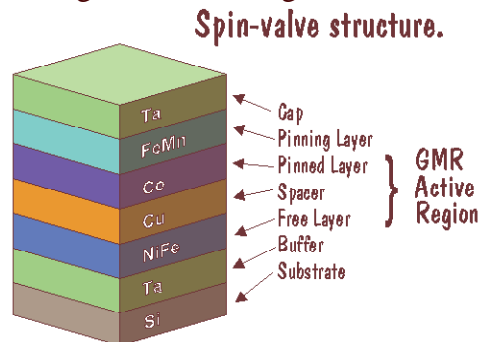
We werken nu verder met deze laatste. Wanneer de overmaat van spins in de beide buitenste (ferromagnetische) lagen dezelfde zin hebben, kunnen spin up elektronen vrij bewegen tussen de beide lagen, doorheen de interface. Spin down elektronen worden verstrooid. Dit wordt voorgesteld in de figuur links:



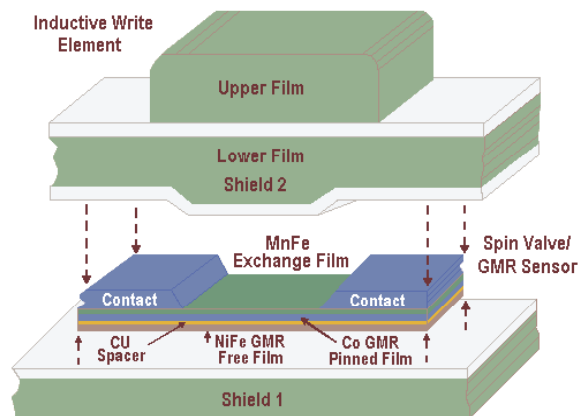
Daar de spin up elektronen als het ware (vereenvoudigd) een kortsluitcircuit vormen, is de weerstand in deze situatie minimaal. Hebben de overmaat van spins in de beide ferromagnetische lagen een tegengestelde zin, dan zullen zowel de spin up als de spin down elektronen verstrooid worden en de weerstand neemt dan ook sterk toe.

2. Het 'spin valve' effect

Voegen we bij de drie GMR-lagen nog een vierde laag toe, bestaande uit een sterk antiferromagnetisch materiaal, dan wordt de magnetisatie-richting van één van de lagen vastgepind.

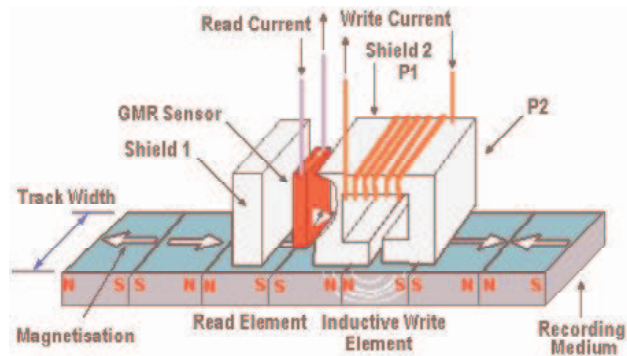


De laatste spinlaag van de antiferromagneet (FeMn) zal er voor zorgen dat de magnetisatie in de koperlaag vastgepind wordt. Deze laag zal er namelijk voor zorgen dat er een lokaal magnetisch veld ontstaat die als resultaat heeft dat de nabijgelegen GMR laag gesatureerd wordt, reeds in afwezigheid van een extern veld. Wanneer een dergelijke structuur boven een zwak magnetisch veld komt (zoals bijvoorbeeld dat van een bit op de hard disk) zal de niet-vastgezette magnetische oriëntatie van de andere laag verdraaien ten opzichte van de vastgepinde oriëntatie van de andere laag. Ten gevolge van het GMR effect zal er hierdoor een aanzienlijke verandering in de elektrische weerstand optreden en we hebben op deze manier dus een 'spin klep', voor het eerst ontwikkeld door IBM¹⁶.

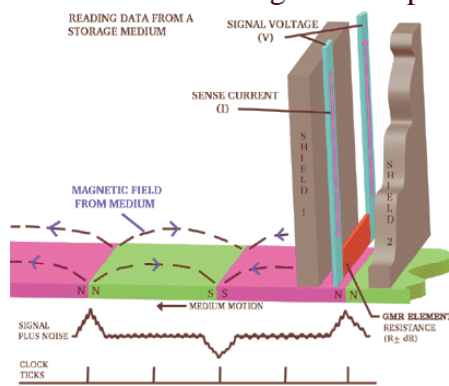


Daar de weerstandsverandering bij GMR koppen percentsgewijs groter is dan voor andere koppen, zijn deze veel gevoeliger voor de magnetische velden van de domeinen op de hard disk, waardoor er een grotere datadichtheid mogelijk is. Net zoals bij de MR koppen maakt men gebruik van een TF kop voor het schrijven.

¹⁶ Voor elk van de hierboven beschreven technologieën was IBM de grondlegger.



Wanneer we een stroom doorheen de GMR kop doen vloeien, zullen de weerstandsveranderingen (die overeenkomen met veranderende magnetische toestanden bij een overgang van N naar Z bits en omgekeerd) gedetecteerd worden als veranderingen in de spanning.



Om bij het lezen van de ene bit geen storende invloed te hebben van een naburig gebied (met andere woorden, om een grotere lees-resolutie te verkrijgen waardoor de bits dichters bij elkaar kunnen geschreven worden (+ smallere tracks) en we dus een grotere opslagcapaciteit verkrijgen) wordt het GMR element afgeschermd.