

MÔ HÌNH HÓA TÍNH TỪ TRONG VẬT LIỆU SẮT TỪ BẰNG MÔ HÌNH ISING

MODELING MAGNETISM OF FERROMAGNETIC MATERIAL USING ISING MODEL

Bùi Thị Minh Tú

Trường Đại học Bách khoa, Đại học Đà Nẵng

Email: thi-minh-tu.bui@dut.edu.vn

Phan Tôn Kỳ Nam

Học viên cao học K24, ngành Kỹ thuật Điện tử,

Đại học Đà Nẵng

Email: kynam81vn@yahoo.com

TÓM TẮT

Mô hình Ising là một trong những công cụ có thể được dùng để mô phỏng từ tính của vật liệu. Chúng tôi xét sự thay đổi chiều của các spin S_i dưới sự tương tác từ với các spin lân cận của chúng, cùng sự ảnh hưởng của từ trường nội ngẫu nhiên h_i và từ trường ngoài $H(t)$ biến thiên đồng nhất, không chịu ảnh hưởng của nhiệt độ. Trong bài viết này, đường cong từ trễ của vật liệu sắt từ được tạo ra bằng cách tính toán độ từ hóa (từ độ) M của một mô hình mạng tinh thể spin hai chiều kích thước 100×100 , khi thay đổi từ trường ngoài H theo một chu trình kín (tăng dần từ giá trị âm sang dương và giảm dần từ giá trị dương về âm). Trên cơ sở đường cong từ trễ thu được, chúng tôi nhận thấy giá trị độ hỗn loạn R của vật liệu ảnh hưởng đến độ dốc của đường cong từ trễ. Với giá trị R nhỏ, đường cong từ trễ có độ dốc lớn và ngược lại.

Từ khóa: đường cong từ trễ; mô hình Ising; vật liệu sắt từ; độ hỗn loạn; từ tính

ABSTRACT

The Ising model is one of the available tools that can be used to model the magnetic property of material. We consider the flip of spins S_i , interacting with their nearest neighbors, under the effect of random local field h_i and a uniform external field $H(t)$, without considering the effect of temperature. In this paper, the ferromagnetic hysteresis loop is generated by measuring the magnetization (M) of a two-dimensional lattice model with 100×100 spins while the external field H is changed in a closed cycle (increasing in the positive direction and reducing in the negative direction). From the hysteresis loop, we understand that the disorder – R of ferromagnetic material affected the slope of the hysteresis curve. The smaller the disorder is, the greater the slope of the hysteresis loop is and vice versa.

Key words: hysteresis loop; the Ising model; ferromagnetic; disorder; magnetism

1. Đặt vấn đề

Sắt, niken, coban và một số đất hiếm (gadolinium, dysprosium) là những vật liệu sắt từ điển hình. Các vật liệu này có từ tính nội tại ngay khi không có từ trường ngoài, nhưng đồng thời cũng có đặc tính hưởng ứng mạnh, thuận theo từ trường ngoài [1].

Hiện tượng từ trễ là một đặc trưng quan trọng và phổ biến ở vật liệu sắt từ. Hiện tượng từ trễ được biểu hiện thông qua đường cong từ trễ (từ độ - từ trường, $M(H)$ hay cảm ứng từ - từ trường, $B(H)$). Quá trình hình thành đường cong từ trễ được mô tả như sau:

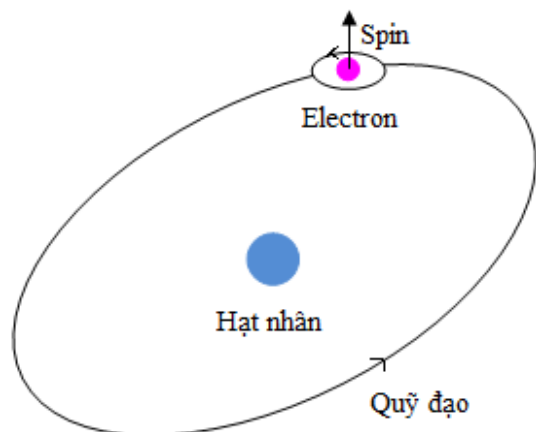
Vật liệu được cấu thành từ các nguyên tử. Các nguyên tử này lại được cấu thành từ các hạt nhân và các electron quay xung quanh nó. Hiện tượng các electron quay quanh chính nó khi

quay quanh hạt nhân của nguyên tử gây ra các momen từ (spin) (Hình 1) [1, 2, 3]. Tính chất từ của vật liệu được tạo thành từ những spin này.

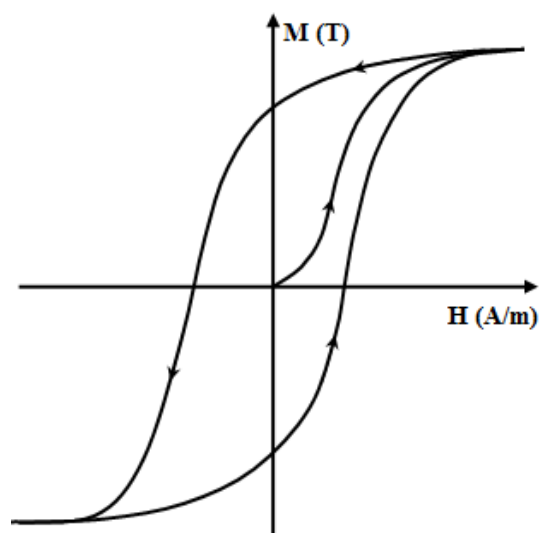
Ở trạng thái ban đầu, các spin quay theo các hướng ngẫu nhiên nên xét một cách tổng thể thì vật liệu trung hòa về mặt từ tính.

Khi từ hóa, vật liệu chịu ảnh hưởng của một từ trường ngoài, các “spin” sẽ có xu hướng sắp xếp trật tự theo hướng từ trường ngoài. Do đó, từ độ của vật liệu tăng dần đến độ bão hòa (khi đó tất cả các “spin” đều song song với nhau). Nếu ta giảm dần từ trường ngoài, thì quá trình từ hóa của vật liệu không quay trở về theo đường cong từ hóa ban đầu, mà đi theo một đường khác. Và nếu ta đảo từ trường ngoài theo một chu trình kín (từ giá trị âm sang giá trị dương và ngược lại), thì quá trình từ hóa sẽ diễn

ra theo một đường cong kín gọi là đường cong từ trễ hay chu trình từ trễ (Hình 2) [1, 2].



Hình 1. Sự hình thành momen từ



Hình 2. Đường cong từ trễ [1, 2]

Dựa trên đường cong từ trễ, chúng ta có thể xác định được các đại lượng đặc trưng của vật liệu sắt từ như: từ độ bão hòa, từ thẩm, từ dư, lực kháng từ...

2. Mô hình Ising

Việc mô hình hóa đường cong từ trễ giúp chúng ta giải quyết các vấn đề thường gặp trong nghiên cứu cũng như ứng dụng của vật liệu từ. Mô hình Ising, mô hình Jiles – Atherton, mô hình Stoner – Wohlfarth... là các mô hình có thể được sử dụng trong việc mô hình hóa tính từ của vật liệu từ.

Mô hình Jiles – Atherton sử dụng hàm Langevin để mô tả sự thay đổi của từ độ M khi từ trường ngoài H thay đổi theo công thức sau:

[4]

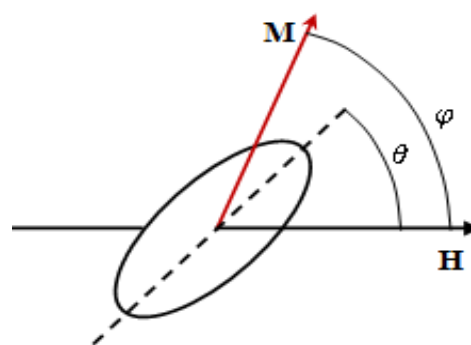
$$M(H) = M_s \cdot L(H) = M_s \left[\coth\left(\frac{H}{a}\right) - \frac{a}{H} \right] \quad (1)$$

Trong đó: a là thông số của mô hình, H từ trường ngoài, M_s từ độ bão hòa.

Mô hình Stoner – Wohlfarth được đưa ra bởi Edmund Clifton Stoner và Erich Peter Wohlfarth vào năm 1948. Trong mô hình này, vector từ độ M xoay khi từ trường ngoài H thay đổi. Năng lượng của spin được tính theo công thức sau: [5]

$$E = K_u \sin^2(\varphi - \theta) - \mu_0 M_s H \cos \varphi \quad (2)$$

Trong đó, M_s là từ độ bão hòa, μ_0 là độ từ thẩm môi trường chân không, H là từ trường ngoài, K_u là mật độ năng lượng bất đẳng hướng, φ là góc giữa vector M và từ trường H , θ là góc giữa từ trường H và trục dễ được mô tả như Hình 3.



Hình 3. Các thông số của mô hình Stoner – Wohlfarth. Đường nét đứt là trục dễ.

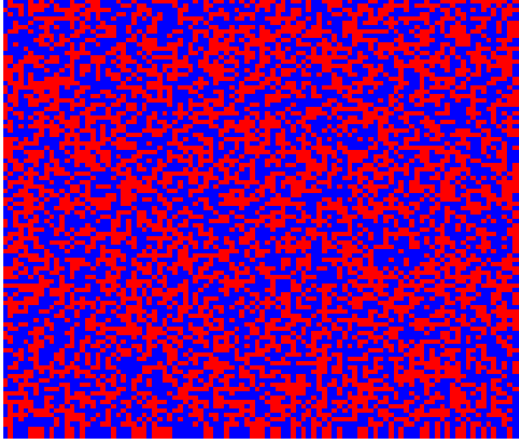
Theo mô hình Jiles – Atherton và mô hình Stoner – Wohlfarth trên, ta không biết được ảnh hưởng của cấu trúc vật liệu hay ảnh hưởng của các quá trình xử lý vật liệu lên tính chất từ của vật liệu. Bên cạnh đó, việc mô phỏng dựa trên hai mô hình trên cũng tương đối phức tạp so với mô hình Ising. Do đó, chúng tôi chọn mô hình Ising làm cơ sở cho việc mô hình hóa tính từ trong vật liệu sắt từ.

Mô hình Ising là mô hình đơn giản trong việc mô hình hóa vật liệu sắt từ, được biết đến bởi nhà khoa học Ernst Ising và học trò của mình Wilhelm Lenz vào năm 1925. Trong bài viết này, chúng tôi sử dụng mô hình Ising hai chiều (2D) không chịu ảnh hưởng của các dao động nhiệt để

mô hình hóa đường cong từ trễ trong vật liệu sắt từ có cấu tạo gồm các spin phân bố hỗn loạn.

MÔ HÌNH ISING 2D KÍCH THƯỚC 100x100

$S_i = -1$, $S_i = +1$



Hình 4. Mô hình Ising 2D kích thước 100x100. Mỗi spin được đại diện bởi một điểm màu xanh ($s_i = -1$) hoặc đỏ ($s_i = +1$)

Theo mô hình Ising, vật liệu sắt từ có thể được mô hình hóa như một mạng tinh thể các “spin” (Hình 4). Mỗi spin mang giá trị $+1$ (hướng lên) hoặc -1 (hướng xuống). Xét một mảng hai chiều có kích thước $N \times N$ là tập hợp các “spin” $s_i = \pm 1$. Mô hình này được xét trong trường hợp được đặt trong một từ trường ngoài $H(t)$ biến thiên chậm theo thời gian và có giá trị $H(t) = (-\infty, +\infty)$. Hàm năng lượng, hàm Hamilton, trong mô hình Ising được định nghĩa như biểu thức (3): [6, 7, 8, 9]

$$E = - \sum_{ij} J s_i s_j - \sum_i H(t) s_i - \sum_i h_i s_i \quad (3)$$

Trong đó:

J là lực liên kết của các spin. Một spin tương tác từ với các spin lân cận của nó bằng lực liên kết J . Để đơn giản hóa, ở đây chúng tôi chọn $J=1$.

h_i là một trường ngẫu nhiên, đại diện cho tính chất độ hỗn loạn của các spin (disorder).

Chúng tôi chọn hàm ngẫu nhiên phân bố Gauss $\rho(h_i)$ với giá trị trung bình bằng 0 và độ lệch chuẩn là R (độ hỗn loạn – disorder) để biểu diễn cho h_i : [6, 10]

$$\rho(h_i) = \frac{1}{R\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{h_i^2}{2R^2}} \quad (4)$$

Trong mô hình này, chỉ xét sự ảnh hưởng giữa các spin lân cận với nhau, dưới tác động của từ trường ngoài thay đổi theo thời gian $H(t)$ và độ hỗn loạn R . Từ trường nội của spin thứ i được định nghĩa như sau: [6, 7, 9]

$$l_i = J \sum_j s_j + h_i + H \quad (5)$$

Khi giá trị từ trường ngoài H tăng dần, từ trường nội l_i cũng tăng dần và sẽ đạt giá trị dương, khi đó spin sẽ thay đổi trạng thái. Một spin thay đổi trạng thái tại thời điểm t sẽ tác động và tạo ra sự thay đổi trạng thái của các spin lân cận với nó tại thời điểm $t+1$. Một spin sẽ thay đổi trạng thái khi nó đạt mức năng lượng cho phép theo hai cách: [6]

- Các spin lân cận với nó thay đổi trạng thái.
- Sự gia tăng của từ trường ngoài $H(t)$.

3. Mô phỏng đường cong từ trễ

3.1. Giải thuật

Có nhiều phương pháp được sử dụng để mô phỏng đường cong từ trễ của vật liệu sắt từ dựa trên mô hình Ising 2D. Trong bài viết này, chúng tôi sử dụng phương pháp xét mức năng lượng của từng spin trong mô hình mạng tinh thể, cụ thể như sau:

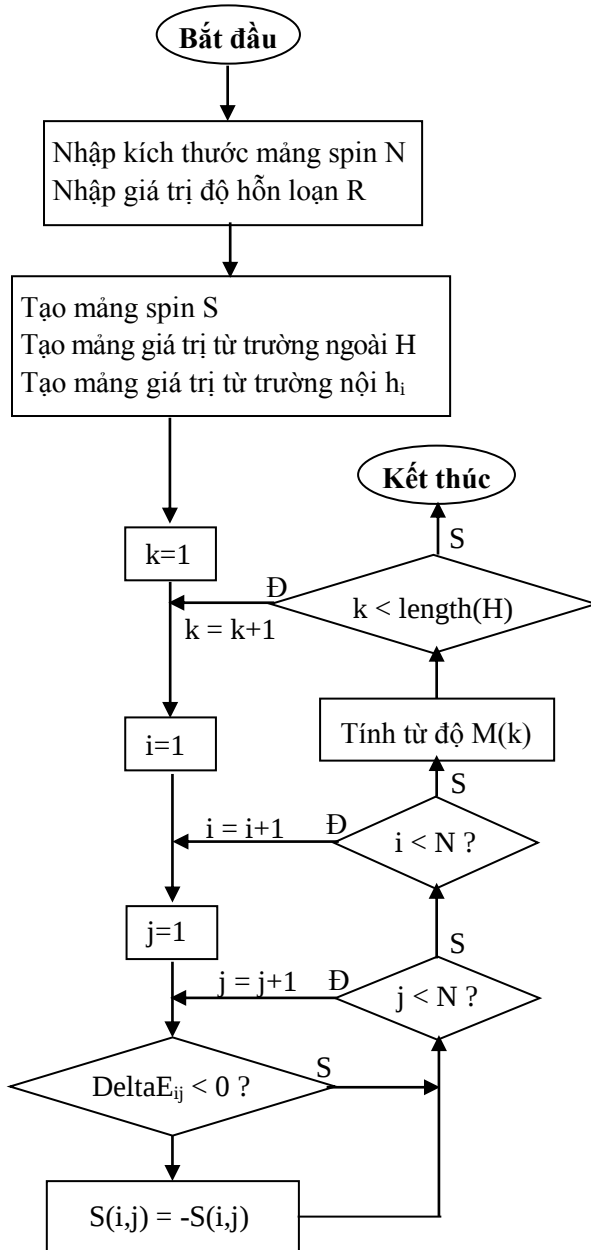
Ban đầu, tạo mảng 2 chiều kích thước $N \times N$ với các giá trị ngẫu nhiên ± 1 mô phỏng mô hình Ising 2D các spin của vật liệu.

Tạo mảng 2 chiều gồm các giá trị phân bố ngẫu nhiên Gauss có giá trị trung bình $\mu = 0$ và $\sigma = R$, mô phỏng cho từ trường nội h_i của vật liệu.

- Ứng với mỗi giá trị của từ trường ngoài H , bắt đầu với $H = 0$, tất cả các spin đều được kiểm tra để xác định xem spin đó có thay đổi trạng thái hay không, biết rằng cấu hình bền vững của vật chất là tồn tại ở mức năng lượng tối thiểu. Bằng cách xác định mức chênh lệch năng lượng của một spin (ΔE) khi nó thay đổi trạng thái ($s_i \rightarrow -s_i$). Nếu $\Delta E < 0$, (sự thay đổi chiều của spin làm giảm năng lượng của hệ thống), spin sẽ thay đổi trạng thái [7, 11]. Khi một spin thay đổi trạng thái, các spin lân cận với nó sẽ được kiểm tra, và cứ thế tiếp tục cho đến spin cuối cùng.

Sau đó, chúng tôi xác định giá trị độ từ hóa (từ độ) trung bình M sau khi xét đến spin cuối cùng trong mạng tinh thể spin: [12]

$$M = \frac{1}{N^2} \sum_i S_i \quad (6)$$



Hình 5. Lưu đồ giải thuật thực hiện mô phỏng

- Tăng giá trị từ trường ngoài H và lặp lại quá trình trên để xác định sự thay đổi trạng thái của các spin trong mạng tinh thể và giá trị từ độ trung bình M .

Qua quá trình mô phỏng trên, chúng tôi xác định được đường cong từ trễ $M(H)$, chính là

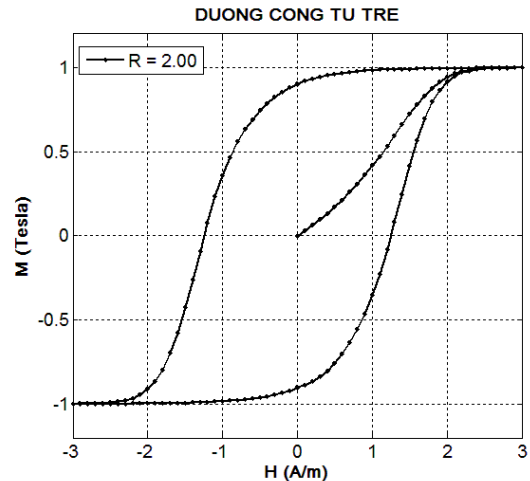
đường biểu diễn giá trị từ độ trung bình M theo từ trường ngoài H .

Lưu đồ giải thuật được mô tả như Hình 5

3.2. Nhận xét

Khi thay đổi từ trường ngoài theo một chu trình kín (từ giá trị âm sang giá trị dương và ngược lại), thì quá trình từ hóa cũng sẽ diễn ra theo một đường cong kín tạo ra đường cong từ trễ $M(H,R)$.

Hình 6 là kết quả mô phỏng đường cong từ trễ của vật liệu sắt từ với mô hình mạng tinh thể spin có kích thước 100×100 , $R = 2$, từ trường ngoài $H = [-3,3]$ và giá trị gia tăng của H là $\Delta H = 0.1$. Đường cong từ trễ theo mô phỏng có hình dạng tương tự đường cong từ trễ theo lý thuyết (Hình 2).



Hình 6. Đường cong từ trễ của vật liệu sắt từ

Ban đầu, khi vật liệu sắt từ chưa được từ hóa (hoặc đã được khử từ hoàn toàn), quá trình từ hóa sẽ theo đường xuất phát từ gốc tọa độ và tăng dần đến giá trị bão hòa dương khi tăng từ trường ngoài H (Hình 6).

Khi vật liệu đạt đến giá trị bão hòa dương, nếu tăng từ trường ngoài H , giá trị từ độ M không thay đổi nữa. Lúc này, tất cả các spin đều sắp xếp cùng chiều với nhau ($s_i = +1$, xoay lên) và cùng chiều với từ trường ngoài.

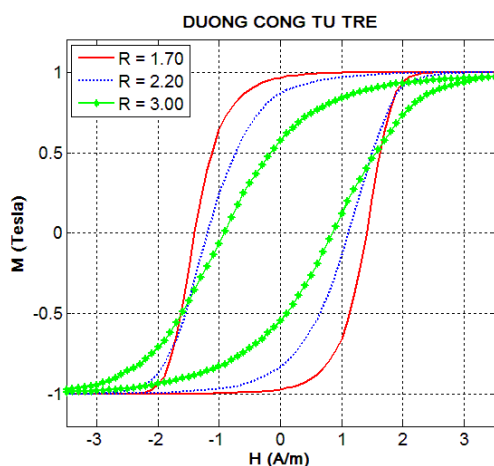
Từ trạng thái bão hòa dương, nếu giảm dần từ trường ngoài H về 0, đường cong từ trễ không theo đường ban đầu. Khi từ trường ngoài $H = 0$, từ độ M có giá trị khác 0. Đây chính là độ từ dư của vật liệu (M_r) [2]. Lúc này, một số spin

vẫn còn cùng hướng với nhau và một số spin đã thay đổi hướng do tác động của từ trường ngoài.

Khi tiếp tục giảm từ trường ngoài theo chiều âm, đường cong từ trễ tiếp tục thay đổi và từ độ M giảm dần về 0. Giá trị từ trường ngoài dùng để khử hết từ dư trên vật liệu gọi là lực kháng từ (hay trường kháng từ H_c). [2]

Nếu tiếp tục giảm từ trường ngoài H theo chiều âm, vật liệu sẽ được từ hóa trở lại và đạt trạng thái bão hòa âm. Lúc này, tất cả các spin sẽ sắp xếp cùng chiều với nhau ($s_i = -1$, xoay xuống).

Khi tăng trở lại từ trường ngoài H theo chiều dương, đường cong từ hóa sẽ đi theo nhánh dưới để đạt đến trạng thái bão hòa dương mà không theo đường ban đầu. Bởi vì từ trường ngoài H còn được sử dụng để khử từ dư trong vật liệu.



Hình 7. Kết quả mô phỏng đường cong từ trễ ứng với các thông số độ hỗn loạn R khác nhau

Hình 7 thể hiện kết quả mô phỏng đường cong từ trễ của vật liệu theo từ trường ngoài H , ứng với các giá trị độ hỗn loạn R khác nhau. Theo kết quả mô phỏng, từ trường ngoài H càng lớn, độ từ hóa M càng cao. Điều này phù hợp với lý thuyết, độ từ hóa được xác định theo công thức sau: [2]

$$M = \chi_m \cdot H \quad (7)$$

χ_m gọi là độ cảm từ (Magnetic susceptibility), thể hiện khả năng phản ứng của vật liệu đối với từ trường ngoài. Một cách rõ

ràng, χ_m thể hiện độ dốc tại một điểm bất kỳ trên đường cong từ trễ [9]. Ứng với giá trị R nhỏ, đường cong từ trễ của vật liệu có độ dốc càng cao, và ngược lại.

Độ từ thẩm tương đối (relative permeability) của vật liệu được xác định theo công thức: [2]

$$\mu_r = 1 + \chi_m \quad (8)$$

Do đó, có thể kết luận rằng, giá trị độ hỗn loạn R thể hiện bản chất của vật liệu. Với giá trị R nhỏ, độ từ thẩm tương đối của vật liệu μ_r lớn và ngược lại.

4. Kết luận

Với giá trị độ hỗn loạn - R lớn, hàm phân bố ngẫu nhiên của từ trường nội h_i rộng hơn, các spin có khuynh hướng thay đổi trạng thái một cách độc lập với nhau. Khi đó, đường cong từ trễ sẽ có độ dốc nhỏ hơn và gần như bằng phẳng hơn. Ngược lại, với độ hỗn loạn nhỏ, sẽ dẫn đến hàm phân bố ngẫu nhiên của từ trường nội h_i hẹp hơn, đường cong từ trễ sẽ có độ dốc lớn hơn.

Thông qua việc mô hình hóa tính từ của vật liệu sắt từ, cụ thể với mô hình đường cong từ trễ của vật liệu, chúng ta có thể biết tính chất từ của chúng. Với những vật liệu sắt từ có đường cong từ trễ phẳng hơn (độ dốc nhỏ hơn) thì độ từ thẩm, giá trị từ dư và độ kháng từ cũng nhỏ hơn... Bên cạnh đó, việc nghiên cứu ảnh hưởng của độ hỗn loạn (disorder) R đến từ tính của vật liệu cũng rất quan trọng. Bằng cách thay đổi quá trình xử lý vật liệu, ta có thể thay đổi từ tính của nó, tạo ra các vật liệu mang từ tính mới, như chuyển từ vật liệu từ cứng sang vật liệu từ mềm và ngược lại. Từ đó, khả năng ứng dụng của vật liệu sắt từ vào thực tế cũng trở nên phổ biến và rộng rãi hơn.

Việc sử dụng mô hình Ising để nghiên cứu từ tính trong vật liệu có thể được tiếp tục bằng cách sử dụng các hàm phân bố ngẫu nhiên khác cho hàm h_i . Tuy nhiên, lúc này, độ hỗn loạn không chỉ được biểu diễn bởi giá trị R mà bởi các tham số đặc trưng của các hàm biểu diễn đó.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] B. D. Cullity, C. D. Graham, *Introduction to Magnetic Materials*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2009.
- [2] Soshin Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*, Oxford University Press, ISBN 0-19-851776-9, 1999.
- [3] Robert C. O' Handley, *Modern Magnetic Materials: Principles and Applications*, John Wiley & Sons, Inc, 2000.
- [4] P. Petrovic, N. Mitrovic, M. Stevanovic and P. Pejovic, "A hysteresis model for magnetic materials using the Jiles-Atherton model", *Proceedings of IEEE Systems Readiness Technology Conference AUTOTESTCON'99*, San Antonio, Texas USA, August 1999, Pages: 803-808.
- [5] C. Tannous and J. Gieraltowski, "The Stoner - Wohlfarth model of Ferromagnetism", *Eur. J. Phys.* v.29, 2008, Page: 475.
- [6] Matthew C. Kuntz, Olga Perkovic, Karin A. Dahmen, Bruce W. Roberts, and James P. Sethna, "Hysteresis, Avalanches, and Noise", *Computing in Science & Engineering*, Volume:1 , Issue: 4, Jul/Aug 1999, Pages: 73-81.
- [7] Deepak Dhar, Prabodh Shukla, and James P. Sethna, "Zero-temperature Hysteresis in Random-field Ising Model on a Bethe Lattice", *J. Phys. Lett.* A30 5259, 1997
- [8] P. Shukla, Hysteresis in an Ising chain with quenched random disorder, *Prog. Theor. Phys*, Vol. 96, Kyoto University, Kyoto 606-01, 1996.
- [9] Gianfranco Durin, Stefano Zapperi, "The Barkhausen effect", *The Science of Hysteresis*, Vol. II, G. Bertotti and I. Mayergoyz eds, Elsevier, Amsterdam, 2006, Pages: 181-267.
- [10] Olga Perkovic, Karin A. Dahmen, and James P. Sethna, "Disorder-Induced Critical Phenomena in Hysteresis: Numerical Scaling in Three and Higher Dimensions", *Phys. Rev.* B59, 6106, 1999.
- [11] A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz , "A new algorithm for Monte Carlo simulation of Ising spin systems", *Journal of Computational Physics*, Volume 17, Issue 1, January 1975, Pages: 10-18.
- [12] J. P. Sethna, K. A. Dahmen, S. Kartha, J. A. Krumhansl, B. W. Roberts, J. D. Shore, "Hysteresis and hierarchies: dynamics of disorder driven first order phase transformations", *Phys. Rev. Lett.* 70, 3347, 1993.

(BBT nhận bài: 17/06/2013, phản biện xong: 30/06/2013)