

## Modellering av magnetism i oordnade material

I det här beräkningsbaserade forskningsprojektet använder vi [Monte Carlo](#)-simuleringar och/eller medelfältsteori för att studera Curietemperaturen i magnetiska material med kemisk oordning. Beroende på intresse kan det omfatta mer av programmering, beräkningar med befintliga koder, eller andra kombinationer av analytiska och numeriska beräkningar.



*Figure 1: Permanentmagneter är nödvändiga för att konstruera t.ex. vindkraftverk. Att hitta nya sådana material är ett hett forskningsområde där FeNi-legeringar studerats flitigt.*

Magnetiska material är oundgängliga inom många viktiga tillämpningar, t.ex. magnetiska lagringseenheter (hårddiskar), nya former av informationsteknologi (spinntronik, magnonik), och permanentmagneter som används till grön energi (t.ex. vindkraftverk) eller elbilar. En av de viktigaste egenskaperna hos ett (ferro-)magnetiskt material är den kritiska Curietemperaturen ( $T_C$ ), under vilken en spontan magnetisering uppstår. Ovanför  $T_C$  försvinner magnetiseringen (i järn t.ex. är  $T_C = 1043$  K).

I kemiska sammansättningar, med flera grundämnen, finns ofta en oordning som markant påverkar materialegenskaper (de olika atomerna byter plats med varandra och hamnar hyller om buller). Detta kan uppstå som en oönskad effekt, eller utnyttjas för att skräddarsy materialegenskaper. I järn-nickel (FeNi) t.ex., får materialet helt andra magnetiska egenskaper beroende på sammansättning och (o-)ordning, vilket kan göra det användbart till antingen permanentmagneter, eller så kallade mjukmagneter (vilka används till transformatorer), med helt motsatta krav på vissa egenskaper.

Att förstå effekten av oordning på magnetiska materialegenskaper är viktigt, men också teoretiskt utmanande, då mycket av teorin för fasta tillståndets fysik baseras på periodicitet (t.ex. Blochs teorem), vilken bryts i oordnade material. Nyligen publicerades intressanta, och intuitivt något förvånande, beräkningar gällande  $T_C$  i oordnad FeNi [1]. Dessa antyder att oordning generellt tenderar att minska  $T_C$ . Resultaten baseras på [Heisenberg-modellen](#)

$$E = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

som är relevant mer allmänt för magnetiska material, och därmed kan förväntas gälla för många andra magneter också.

### Vi lär oss mer om:

Fasta tillståndets fysik/materialfysik, beräkningsfysik, statistisk fysik, magnetism och magnetiska material

[1] [A. Izardar and C. Ederer, Phys. Rev. B 105, 134428 \(2022\).](#)

**Kontakt:** Alexander Edström, [aleeds@kth.se](mailto:aleeds@kth.se)  
Material- och nanofysik