Computersimulationen zur Dynamik magnetischer Nanostrukturen

Von der Fakultät für Naturwissenschaften der

Gerhard-Mercator-Universität Duisburg

zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

genehmigte Dissertation

von

Denise Hinzke

aus Dinslaken

Referent: Prof. Dr. Klaus D. Usadel

Korreferent: Prof. Dr. Dietrich E. Wolf

Tag der mündlichen Prüfung: 29. Januar 2002

Kurzfassung

Magnetische Nanostrukturen spielen für die Grundlagenforschung im Bereich der Informationstechnologie eine große Rolle seit es möglich geworden ist, diese kontrolliert herzustellen und zu untersuchen. Im Zuge der Miniaturisierung magnetischer Strukturen sind neue physikalische Effekte entdeckt worden. Thermisch aktivierte Ummagnetisierungsprozesse lassen sich nicht mit Theorien erklären, die makroskopische Ferromagnete beschreiben. Von besonderem Interesse ist das Verständnis des Einflusses von endlichen Temperaturen auf das Ummagnetisierungsverhalten sowie auf die magnetische Stabilität von ferromagnetischen Partikeln, da diese Aspekte relevant sind für die Entwicklung neuer magnetischer Datenspeicher.

In dieser Dissertation wird ein Überblick über numerische Methoden gegeben, die auf einem klassischen Spinmodell beruhen, mit deren Hilfe thermisch aktivierte Ummagnetisierungsprozesse untersucht werden können. Für die Simulationen wird zum einen die numerische Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit Langevin-Dynamik und zum anderen eine Monte-Carlo-Methode in Kombination mit einem sogenannten quantifizierten Zeitschritt verwendet. Dieses neuartige Verfahren ermöglicht es, die quasi-Zeitskala der Monte-Carlo-Simulation auf realistische Zeitintervalle abzubilden.

Das thermisch aktivierte Ummagnetisierungsverhalten von verschiedenen Nanostrukturen wird in dieser Arbeit untersucht. Neben dem Kurzzeitverhalten wird hauptsächlich das Langzeitverhalten von zylindrischen Strukturen untersucht, in denen unterschiedliche Ummagnetisierungmoden wie kohärente Rotation, Nukleation und *Curling* in Abhängigkeit von der Probengeometrie und den Materialparametern gefunden werden. Für den eindimensionalen Grenzfall existieren asymptotische analytische Lösungen für die Energiebarrieren sowie die charakteristischen Zeiten, so daß dieses Modell zur Überprüfung der entwickelten numerischen Verfahren geeignet ist. Die Implementierung der Fast-Fourier-Transformations-Methode in die Monte-Carlo-Methode sowie die Interpretation des verwendeten klassischen Spinmodells als eine Diskretisierung des Kontinuumsmodells erlaubt die Computersimulationen realistischer Systeme.

Eine solche Anwendung ist die Untersuchung von thermischen Ummagnetisierungsprozessen in nanostrukturierten Leiterbahnen während des Durchlaufens einer Hysterese. Mittels dieser so gewonnenen Einblicke in die auftretenden Ummagnetisierungsmoden können Rückschlüsse auf den Magnetowiderstand gezogen werden. Die aus diesen Untersuchungen resultierenden numerischen Daten stehen in Einklang mit experimentell gewonnenen Daten aus Untersuchungen an nanostrukturierten Co-Leiterbahnen.

Summary

Magnetic nanostructures play a crucial role for the research in information technology, since magnetic materials are controllable on a nanometer scale. With decreasing size novel physical effects are observed which cannot be explained by means of theories describing macroscopic ferromagnets. In particular the understanding of the influence of finite temperatures on the reversal behavior and the magnetic stability of nanostructures is of broad interest since these aspects are very important for the development of new magnetic storage devices.

This work gives an overview of numerical methods basing on a classical spin model. With the aid of these methods thermal activation processes can be investigated. The numerical solution of the Landau-Lifshtiz-Gilbert equation with Langevin dynamics as well as the Monte Carlo method with a so-called quantified time step is presented. This new procedure maps the quasi time scale of a Monte Carlo simulation on a realistic time scale.

In this work activated magnetization processes in different kinds of nanostructures are investigated. Besides the investigation of fast switching processes, mainly the long-time behavior of elongated particles is studied. In these models different reversal mechanisms like coherent rotation, nucleation and curling can be observed depending on the sample geometry and the material parameters. In the one dimensional case, analytical asymptotic solutions for the energy barrier and the characteristic time exist, so that this model is convenient for testing the developed numerical methods. The implementation of the Fast Fourier Transformation method in the Monte Carlo method as well as the interpretation of the classical spin model in the sense of the continuums theory allows for a computer simulation of realistic systems

An application is the investigation of thermally activated reversal processes in nanowires during a hysteresis loop. The insights in the occurring reversal modes give information about the expected magnetoresistance. The results of these numerical investigations are compatible with the data from experimental observations of Co nanowires.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung **i**

Summary **iii**

Inhaltsverzeichnis **v**

Abbildungsverzeichnis **vii**

Tabellenverzeichnis **xi**

1 Motivation und Einleitung **1**

2 Physikalische Grundlagen **7**
2.1 Klassisches Spinmodell 7
2.2 Mikromagnetismus 9
2.3 Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung 14
2.4 Ummagnetisierungsprozesse und Superparamagnetismus 17

3 Numerische Methoden **25**
3.1 Numerische Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung . . . 25
3.2 Fast-Fourier-Transformations-Methode 28
3.3 Monte-Carlo-Simulationen 30
3.4 Zeitquantifizierung des Monte-Carlo-Verfahrens 34
3.5 Fast-Fourier-Transformation im Monte-Carlo-Verfahren 36
3.6 Mikromagnetische Simulationen 38

4 Test der Algorithmen **41**
4.1 Vergleich mit OOMMF 41
4.2 Spinpräzession, Relaxation und Fluktuation 48
4.3 Néel-Brown-Modell 52

5 Thermisch aktivierte Ummagnetisierung in Nanostrukturen **57**
5.1 Spinkette 57
5.1.1 Kohärente Rotation 60
5.1.2 Soliton-Antisoliton-Nukleation 63
5.1.3 *Multidroplet*-Nukleation 65

5.1.4 Übergänge zwischen den Ummagnetisierungsmoden . . . 67
5.2 Spinkette mit Dipol-Dipol-Wechselwirkung 72
5.3 *Curling* 74

6 Ummagnetisierung in Co-Leiterbahnen 79
6.1 Experimentelle Untersuchungen 79
6.2 Remanente Domänenzustände in Dünnschichtelementen 84
6.3 Modellierung der Co-Leiterbahn 86
6.4 Simulationsergebnisse 88
6.4.1 Die Grenzfälle schmaler und breiter Leiterbahnen 88
6.4.2 Breiten- und Winkelabhängigkeit der Koerzitivfelder . . 94
6.5 Diskussion weiterer Einflüsse auf die Ummagnetisierungsprozesse 97
6.5.1 Einfluß der Form der Enden 97
6.5.2 Einfluß der polykristallinen Anisotropie 100

7 Zusammenfassung 105

A Programmstruktur 109

Literaturverzeichnis 114

Abbildungsverzeichnis

1.1 Skizze des Energieverlaufs eines Stoner-Wohlfarth-Partikels ohne den Einfluß eines äußeren Magnetfelds 2

2.1 Skizze zur Herleitung der Streufeldenergie 12
2.2 Skizze des Relaxations- sowie des Präzessionsprozesses eines magnetischen Moments in einem Magnetfeld 16
2.3 Skizze einer Hysteresekurve 17
2.4 Skizze eines Stoner-Wohlfarth-Partikels 18
2.5 Skizze des winkelabhängigen Energieverlaufs eines Stoner-Wohlfarth-Partikels in einem äußeren Magnetfeld 19

3.1 Skizze zur Verdeutlichung der *zero padding*-Methode 29
3.2 Darstellung der möglichen Übergänge zwischen den Zuständen eines Systems 31
3.3 Schematische Darstellung des *single spin flip*-Algorithmus 32
3.4 Skizzen verschiedener Monte-Carlo-Versuchsschritte 33
3.5 Abhängigkeit der charakteristischen Zeit vom *update*-Intervall der Dipolfelder 37
3.6 Systemgrößenabhängigkeit der Rechenzeiten mit und ohne FFT-Methode 37

4.1 Skizze eines diskretisierten Films 42
4.2 Hysteresekurve eines Films mit einer Diskretisierung a von 20nm 43
4.3 Farbkreis zur Erläuterung der Farbkodierung 44
4.4 Momentaufnahmen während des Ummagnetisierungsvorgangs eines Films ($a = 20$nm) 45
4.5 Hysteresekurven von Filmen mit unterschiedlicher Diskretisierungen 46
4.6 Momentaufnahmen während des Ummagnetisierungsvorgangs eines Films ($a = 5$nm) 47
4.7 Skizze eines Rotationsellipsoiden in einem äußeren Magnetfeld . 48
4.8 Zeitabhängigkeit der Magnetisierung eines Rotationsellipsoiden mit geringer Dämpfung ($\alpha = 0.01$) 50
4.9 Darstellung der Präzessionsbewegung eines magnetischen Moments in einem äußeren Magnetfeld 50

4.10 Zeitabhängigkeit der Magnetisierung eines Rotationsellipsoiden mit Dämpfung ($\alpha = 0.1$). 51
4.11 Zeitabhängigkeit der Magnetisierung eines Rotationsellipsoiden im Magnetfeld im überdämpften Fall unter Berücksichtigung thermischer Fluktuationen 52
4.12 Zeitabhängigkeit der x- und z-Komponente sowie des Betrags des reduzierten magnetischen Moments eines thermisch aktivierten eindomänigen Systems 53
4.13 Verteilung der charakteristischen Zeiten eines eindomänigen Systems 54
4.14 Temperatuabhängigkeit der charakteristischen Zeit eines eindomänigen Systems 55

5.1 Skizze einer Spinkette 58
5.2 Skizze zur Dipolwechselwirkungsenergie zweier magnetischer Momente 59
5.3 Abhängigkeit der charakteristischen Zeit von der Dämpfungskonstanten für den Fall der Spinkette 60
5.4 Momentaufnahme einer Spinkette während eines Ummagnetisierungsprozesses mittels kohärenter Rotation 61
5.5 Temperaturabhängigkeit der charakteristischen Zeit einer kohärent rotierenden Spinkette 62
5.6 Momentaufnahme einer Spinkette während eines Ummagnetisierungsprozesses mittels Soliton-Antisoliton-Nukleation 63
5.7 Temperaturabhängigkeit der charakteristische Zeit im Fall der Soliton-Antisoliton-Nukleation 65
5.8 Momentaufnahme einer Spinkette während eines Ummagnetisierungsvorgangs mittels *multidroplet*-Nukleation 66
5.9 Darstellung der Bereiche der unterschiedlichen Ummagnetisierungsmechanismen mit zugehörigen Übergangslinien 69
5.10 Skizze zur Verdeutlichung der Korrelationsfunktion 70
5.11 Systemgrößenabhängigkeit der Korrelationsfunktion $c_y(L/2)$ für verschiedene Magnetfelder 71
5.12 Systemgrößenabhängigkeit der charakteristischen Zeit τ für zwei verschiedene Temperaturen 72
5.13 Temperaturabhängigkeit der charakteristischen Zeit für eine Spinkette mit offenen Rändern und Dipol-Dipol-Wechselwirkung 73
5.14 Momentaufnahmen der Ummagnetisierungsprozesse in zylindrischen Systemen 75
5.15 Momentaufnahmen eines ellipsenförmigen Nanopartikels während der Ummagnetisierung mittels *Curling* 77

5.16 Darstellung einer Querschnittsfläche des Systems aus Abbildung 5.15 77

6.1 Transmissionselektronenmikroskopische Aufnahme einer Co-Leiterbahn 80
6.2 Longitudinaler und senkrechter Magnetowiderstand einer 154nm breiten Leiterbahn für hohe Magnetfelder 82
6.3 Longitudinaler Magnetowiderstand einer 154nm breiten Leiterbahn für kleine Magnetfelder 83
6.4 Longitudinaler Magnetowiderstand einer 1μm breiten Leiterbahn 83
6.5 Schematische Darstellung einer Landau-Struktur 84
6.6 Schematische Darstellung verschiedener remanenter Strukturen . 85
6.7 Skizze der Geometrie einer Leiterbahn 87
6.8 Hysteresekurve eines Systems mit und ohne Aufrauhung 88
6.9 Momentaufnahmen eines Systems ohne Aufrauhung 89
6.10 Momentaufnahmen während des Ummagnetisierungsvorgangs eines 320nm breiten Systems 90
6.11 Hysteresekurve für zwei verschiedene Leiterbahnbreiten 91
6.12 Momentaufnahmen während des Ummagnetisierungsvorgangs eines 80nm breiten Systems 93
6.13 Magnetfeldabhängigkeit der longitudinalen und senkrechten Magnetisierung eines 320nm breiten Systems 94
6.14 Breitenabhängigkeit der Koerzitivfelder 95
6.15 Winkelabhängigkeit der Koerzitivfelder 96
6.16 Momentaufnahmen eines Systems mit Endstücken 98
6.17 Vergleich der Hysteresekurven eines Systems mit und ohne Endstücke 99
6.18 Momentaufnahmen eines 84nm breiten Systems mit polykristalliner Anisotropie 101
6.19 Vergleich der Hysteresen eines Systems ohne und mit polykristalliner Anisotropie 102
6.20 Momentaufnahmen eines 448nm breiten Systems mit polykristalliner Anisotropie 103

A.1 Schematische Darstellung des Programmaufbaus 110

Tabellenverzeichnis

2.1 Von der Kristallstruktur abhängiger Faktor c der Austauschenergie E_J 10
2.2 Materialparameter von Co und Fe 14
2.3 Verwendete physikalische Konstanten 15

A.1 Liste der einzelnen Bibliotheken 109
A.2 Liste einiger Initialisierungsfunktionen 109
A.3 Liste von Fast-Fourier-Transformations-Bibliotheken 112
A.4 Liste einiger Funktionen zur Datenausgabe 112

1 Motivation und Einleitung

Die Nanotechnologie wird als eine der Schlüsseltechnologien des 21. Jahrhunderts bezeichnet. Sie spielt eine große Rolle für neue Entwicklungen in den unterschiedlichsten Bereichen, wie unter anderem in der Energietechnik, der Umwelttechnik, der Informationstechnik sowie in der Biologie. Die Nanotechnologie beschäftigt sich mit Partikeln oder Systemen, deren räumliche Ausdehnung nur wenige Nanometer[1] beträgt.

In dieser Arbeit liegt der Schwerpunkt auf dem Bereich magnetischer Nanopartikel und -strukturen. Mit der Möglichkeit magnetische Strukturen und Partikel auf nanoskaliger Dimension kontrollieren zu können, sind neue physikalische Effekte gefunden worden. Das Verständnis dieser Effekte sowie die Entwicklung neuer Meßmethoden zur Untersuchung solcher nanoskaligen Strukturen ist ein Gegenstand der aktuellen Forschung. Ein weiterer Punkt, der in diesem Bereich von Interesse ist, ist die Entwicklung neuer Herstellungsverfahren [1]. Nicht nur das Verständnis des Magnetismus kleiner magnetischer Partikel und Strukturen hat in den letzten Jahren zunehmend an Bedeutung gewonnen, sondern auch ihre industrielle Anwendung [2]. Hierbei liegt ein Schwerpunkt des Interesses in der Untersuchung der Dynamik von wechselwirkenden Spinsystemen, um unter anderem neue Technologien in der Spinelektronik entwickeln zu können [2, 3]. Ein weiteres Beispiel für die Anwendung magnetischer Nanostrukturen ist der Bereich der Informationstechnologie, wo die Entwicklung magnetischer Speicher angestrebt wird, die aus einer Anordnung isolierter, eindomäniger (*single-domain*) magnetischer Nanostrukturen bestehen, um so die Speicherdichte zu erhöhen [2].

Im folgenden werden die physikalischen Effekte aufgezeigt, die im Bereich kleiner Längenskalen auftreten, und die sich erheblich von den physikalischen Effekten unterscheiden, die in makroskopischen Ferromagneten auftreten. Ein makroskopischer Ferromagnet befindet sich im allgemeinen in einem mehrdomänigen Zustand [4, 5]. Das magnetische Verhalten beruht zum einen auf der atomaren Struktur des zugrundeliegenden Materials und zum anderen auf dem sich einstellenden Gleichgewicht der unterschiedlichen magnetischen Energieterme. Hierzu gehören die Zeeman-Energie, die aufgrund der Wechselwirkung mit einem äußeren Magnetfeld entsteht, sowie die Streufeldenergie, die durch die Form der Probe beeinflußt wird. Die Ursprünge der Domänentheorie, die die Grundlage

[1] Die Silbe Nano stammt übrigens aus dem griechischen und bedeutet Zwerg.

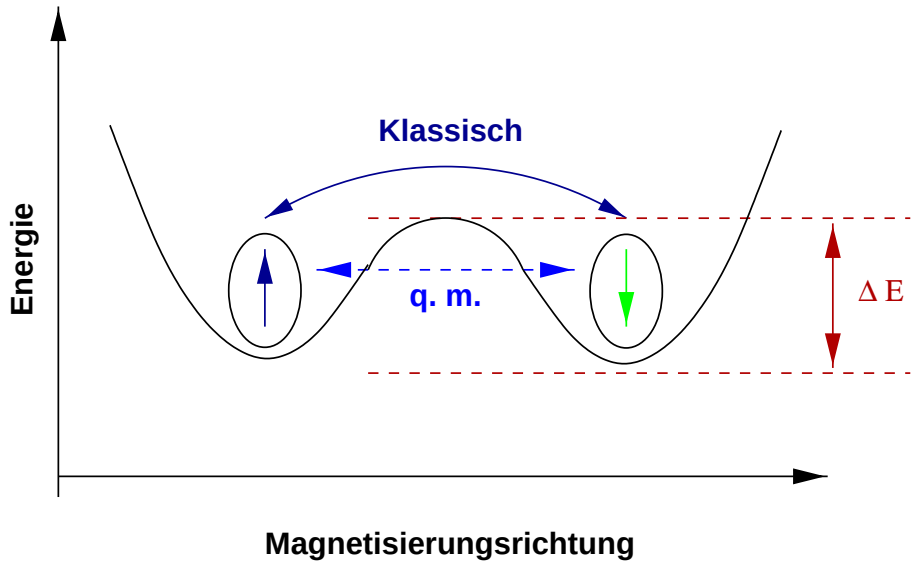


Abbildung 1.1: Ein Stoner-Wohlfarth-Partikel besitzt zwei stabile Zustände, wenn es von keinem äußeren Magnetfeld beeinflußt wird: Der aufmagnetisierte Zustand (*up state*), wenn die Magnetisierung parallel zur leichten Achse orientiert ist, und der abwärtsmagnetisierte Zustand (*down state*), wenn die Magnetisierung antiparallel zu ihr orientiert ist. Die Energiebarriere ΔE, die die zwei stabilen Zuständen voneinander trennt, kann aufgrund von thermischen Fluktuation sowie aufgrund von quantenmechanischen Effekten überwunden werden.

für das Verständnis der magnetischen Eigenschaften wie Anisotropien, Koerzitivfelder und Hysteresekurven bildet, gehen zurück auf Überlegungen von Landau und Lifshitz (1935) [6].

Auf ausreichend kleinen Längenskalen ist die Entstehung von Domänenstrukturen energetisch ungünstig. Dies hat zur Folge, daß ein Partikel einen langreichweitigen eindomänigen Zustand (*single domain state*) annimmt [4]. Die einfachste Beschreibung der Hysterese eines solchen eindomänigen Partikels stammt von Stoner und Wohlfarth (1949) [7], die die Energie eines magnetischen Teilchens, welches kohärent rotiert, berechnet haben (ohne Berücksichtigung thermischer Fluktuationen). In Abbildung 1.1 ist die Energie in Abhängigkeit von der Magnetisierungsrichtung eines solchen Partikels skizziert. Liegt kein äußeres Feld an, so besitzt das betrachtete magnetische Partikel zwei stabile Zustände. Wird ein Feld angelegt, so entsteht ein metastabiler und ein stabiler Zustand. Diese zwei möglichen Zustände werden durch eine endliche Energiebarriere voneinander getrennt, so daß bei endlichen Temperaturen eine gewisse Wahrscheinlichkeit besteht, daß das System aufgrund von thermischen Fluktuationen diese Energiebarriere überwindet. Die ersten theoretischen Beschreibungen thermisch aktivierter Ummagnetisierungseffekte (*thermal activated magne-*

tization reversal) stammen von Néel (1949) [8] und Brown (1963) [9]. Sie haben gefunden, daß diese Art von Ummagnetisierungsprozessen durch die sogenannte charakteristische Zeit τ beschrieben werden kann. Diese Zeit τ gehorcht einem Arrhenius Gesetz, $\tau = \tau_0 \exp \Delta E / k_\mathrm{B} T$. Ein besonderes Interesse besteht darin, den Vorfaktor τ_0 der charakteristischen Zeit für die verschiedensten Strukturen theoretisch beschreiben zu können [10–12], da es sich hierbei nicht, wie noch von Néel angenommen wurde, um eine Konstante handelt. Im Fall der kohärenten Rotation ist die Energiebarriere ΔE proportional zum Partikelvolumen, während sie in komplizierteren Strukturen kein triviales Verhalten besitzt. Dies hat zur Folge, daß ebenfalls ein großes Interesse daran besteht, diese Energiebarriere für verschiedene Systeme theoretisch beschreiben zu können [11].

Das Verständnis thermisch aktivierter Ummagnetisierungsprozesse ist von sehr großem Interesse, da die zukünftigen magnetischen Datenspeicher aus Feldern eindomäniger Partikel bestehen sollen, und die magnetische Stabilität bei Raumtemperatur in diesem Zusammenhang eine bedeutende Rolle spielt [13]. Die fundamentale Grenze bei der Miniaturisierung dieser Speicher ist gegeben durch das sogenannte superparamagnetische Limit.

Mit Hilfe der Betrachtung eines Stoner-Wohlfarth-Partikels wird verdeutlicht, was unter Superparamagnetismus verstanden wird: Hierzu wird die zeitlich gemittelte Magnetisierung dieses eindomänigen Partikels herangezogen. Geht diese Magnetisierung auf Zeitskalen, die größer sind als die charakteristische Zeit τ, gegen Null, so liegt Superparamagnetismus vor. Ob die Magnetisierung gegen Null geht oder nicht, hängt wiederum von der Zeitauflösung der Messung ab. Der Superparamagnetismus ist also ein dynamischer Effekt und kein wohl definierter Gleichgewichtszustand. Dieser Effekt ist von großer Bedeutung im Bereich der magnetischen Datenspeicherung, die auf nanoskaligen magnetischen Partikeln beruhen. Der magnetische Zustand, der die Information trägt, muß auf sehr langen Zeiten bei Raumtemperatur stabil sein, damit die gespeicherten Daten erhalten bleiben [14]. Mit anderen Worten heißt das also, daß für die magnetische Datenspeicherung keine superparamagnetischen Partikel verwendet werden können. Hierbei hilft die Kenntnis des sogenannten superparamagnetischen Limits, der Grenze, bei der ein Partikel auf einer Zeitskala von einigen Jahren superparamgnetisch wird.

In herkömmlichen magnetischen Speichermedien ist das superparamagnetische Limit durch eine minimale Partikelgröße von 10nm gegeben. Dies entspricht einer maximalen Speicherdichte von einigen Tbit/inch^2 [2]. Momentan besitzen die im Handel erhältlichen Festplatten eine Speicherdichte von $\approx$ 15 Gbit/inch^2. Diese Dichte entspricht in etwa 18 Gbit pro Platte. Die neuesten entwickelten Festplatten (Stand: 1. Juni 2001) von Seagate besitzen eine Speicherdichte von 32.6 Gbit/inch^2, was 40 Gbit pro Platte entspricht. Die neuesten Festplatten von IBM besitzen eine Speicherkapazität von 35.3 Gbit/inch^2 (Stand: 25. Juni 2001).

Wird die Ausdehnung von Partikeln oder Clustern auf einige Atome reduziert, so setzen quantenmechanische Effekte ein. Diese führen zu zusätzlichen Ummagnetisierungsmoden, die im Bereich tiefer Temperaturen durch den Tunneleffekt dominiert werden [15, 16]. Dieser quantenmechanische Charakter von Nanostrukturen soll in einigen Jahren für technische Anwendungen ausgenutzt werden. Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt allerdings auf der Untersuchung des Einflusses der thermischen Aktivierung auf die Stabilität von magnetischen Partikeln und Strukturen im Nanometerbereich, wobei quantenmechanischen Effekte nicht berücksichtigt werden.

Bisher war es nur möglich, das Ummagnetisierungsverhalten von Ensemblen von nanostrukturierten Partikeln experimentell zu untersuchen. In solchen Systemen sind sowohl die Größen der Partikel als auch die Anisotropieachsen zufällig verteilt [2]. Diese Verteilung dieser Größen beeinflußt die Interpretation der Messungen. Die ersten Messungen von Ummagnetisierungszeiten isolierter, nanoskaliger Partikel [17, 18] und Drähte [19, 20] gelangen erst kürzlich Wernsdorfer et al. Für ausreichend kleine Partikel [18] wurde eine Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen gefunden, die von Néel [8] und Brown [9] stammen. Diese beschreiben das thermisch aktivierte Ummagnetisierungsverhalten eines Stoner-Wohlfarth-Partikels, das mit Hilfe der kohärenten Rotation ummagnetisiert. Bei der Untersuchung größerer Partikel [18] und Drähte [19, 20] wurde ein Aktivierungsvolumen gefunden, das sehr viel kleiner ist als das zugehörige Partikel- und Drahtvolumen. Diese Ergebnisse sind also ein Hinweis darauf, daß kompliziertere Ummagnetisierungsprozesse — wie Nukleation oder das sogenannte *Curling* — eine Rolle spielen.

Die ersten numerischen Untersuchungen von thermisch aktivierten Ummagnetisierungsprozessen basieren auf Monte-Carlo-Simulationen. Zunächst wurden Nukleationsprozesse basierend auf dem Ising-Modell [21–26] untersucht. Im nächsten Schritt wurden diese Untersuchungen auf die Verwendung von Vektorspin-Modellen [25–28] ausgeweitet, so daß das Ummagnetisierungsverhalten von magnetischen Systemen mit kontinuierlichen Freiheitsgraden untersucht werden konnte. Die Verwendung der Monte-Carlo-Simulationen ist in diesem Zusammenhang nicht unproblematisch. Der Grund liegt darin, daß diese Methode aus der Gleichgewichtsthermodynamik kommt, so daß eine quantitative Interpretation der numerischen Ergebnisse im Sinne einer realistischen Dynamik fraglich ist. Dieses Problem wurde erst kürzlich gelöst durch die Entwicklung einer Monte-Carlo-Methode, die einen sogenannten quantifizierten Zeitschritt (*quantified time step*) enthält. Diese Methode wurde erst für ein einfaches Testsystem, nämlich einen einzelnen Spin [14, 29, 30], vorgestellt und anschließend auf ein einfaches wechselwirkendes System, die Spinkette [14, 31, 32], übertragen. Der Vorteil bei dieser Methode besteht darin, daß ein Monte-Carlo-Schritt als ein realistischer Zeitschritt interpretiert wird. Hierzu wird ein Monte-Carlo-Schritt mit einem Zeitintervall beruhend auf einer Langevin-Gleichung verglichen.

Bei der Langevin-Dynamik-Gleichung handelt es sich um eine stochastische Bewegungsgleichung, die auf der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung beruht. Es ist natürlich auch möglich, das Ummagnetisierungsverhalten von Nanostrukturen numerisch zu untersuchen, indem die Langevin-Gleichung direkt numerisch integriert wird [33–40]. Da es sich hier um eine stochastische Differentialgleichung mit multiplikativem Rauschen handelt, ist bei der Auswahl der numerischen Integrationsmethode Vorsicht geboten [35]. Da die direkte Integration der Bewegungsgleichung mit einem hohen Rechenzeitaufwand im Vergleich zur Monte-Carlo-Methode verbunden ist, liegt der Vorteil der neu entwickelten Monte-Carlo-Methode auf der Hand.

Ein wichtiger Aspekt bei der Verwendung sowie der Entwicklung numerischer Methoden ist das Vorhandensein einfacher, analytisch lösbarer Modelle zur Überprüfung der numerischen Verfahren. Für einige einfache Modelle, wozu ein Ensemble von Stoner-Wohlfarth-Partikeln [8–12, 41, 42] sowie ein eindimensionales Modell [43–45] gehören, ist die charakteristische Zeit bekannt. Hier wurde die charakteristische Zeit mit Hilfe der Fokker-Planck-Gleichung analytisch berechnet. Diese einfachen Modelle bilden die Basis, um mit den neu entwickelten numerischen Verfahren das Ummagnetisierungsverhalten komplizierterer, mehrdimensionaler Nanostrukturen untersuchen zu können.

Die physikalischen Grundlagen des Verhaltens magnetischer Systeme im Kurzzeitbereich von wenigen Femtosekunden bis hin zu Nanosekunden sind weitgehend unverstanden. Diese Art der Dynamik spielt im Hinblick auf die Entwicklung neuer magnetischer Sensoren und Speicherelemente jedoch eine große Rolle. Die ersten Experimente aus dem Bereich des schnellen magnetischen Schaltens auf kurzen Zeitskalen wurden am Stanford-Linear-Acceleration Center durchgeführt [46]. Hierbei wird der Schaltvorgang durch Magnetfeldpulse im Picosekundenbereich ausgelöst [46, 47]. Der Schaltvorgang ist durch kohärente Präzession der Magnetisierung dominiert und kann nicht dissipativ erfolgen [48, 49]. Der Einfluß von Präzessionseffekten auf den Schaltvorgang wird erst seit kurzem mit Hilfe der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung theoretisch untersucht [39, 40, 48, 50].

Diese Dissertation hat folgenden Aufbau: Im nächsten Kapitel werden die physikalischen Grundlagen vorgestellt, die für diese Arbeit relevant sind. Zunächst wird das klassische Heisenberg-Modell, die Theorie des Mikromagnetismus[2] sowie die in diesem Zusammenhang verwendeten Energieterme, wie beispielsweise die Zeeman-Energie, ausführlich diskutiert. Weiterhin wird die in dieser Arbeit benötigte Bewegungsgleichung (Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit Langevin-Dynamik) ebenso vorgestellt wie auch die theoretischen Grundlagen zur Charakterisierung von thermisch aktivierten Ummagnetisierungsprozessen.

[2] Die Silbe Mikro stammt ebenfalls aus dem griechischen und bedeutet klein.

Kapitel 3 befaßt sich mit den einzelnen Simulationsmethoden. Hierzu gehören insbesondere die Monte-Carlo-Methode in Kombination mit einem quantifizierten Zeitschritt, dessen Herleitung erläutert wird, sowie die numerische Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit und ohne thermisches Rauschen. Die Fast-Fourier-Transformations-Methode, die in beiden Methoden zur Berechnung der Dipol-Dipol-Wechselwirkung implementiert wurde, wird ebenfalls präsentiert. Neben diesen Methoden wird noch eine weitere numerische Methode aufgeführt, die in dem frei erhältlichen mikromagnetischen Code OOMMF verwendet wird, der in dieser Arbeit zu Vergleichszwecken herangezogen wird.

In Kapitel 4 wird das in dieser Dissertation verwendete Programm, das auf einem klassischen Spinmodell beruht, verglichen mit mikromagnetischen Rechnungen. Anschließend werden die in dieser Arbeit verwendeten Simulationsmethoden ausführlich anhand einfacher Systeme getestet. Hierzu wird sowohl das Kurzzeit- als auch das Langzeitverhalten dieser Systeme in einem äußeren Magnetfeld untersucht.

Ausgehend von diesen Tests wird anschließend (Kapitel 5) das thermisch aktivierte Ummagnetisierungsverhalten komplizierterer Strukturen studiert. Dazu gehört eine über die theoretisch bekannten Grenzfälle hinausgehende Untersuchungen einer klassischen Spinkette, wobei die Übergänge zwischen den einzelnen Ummagnetisierungsmoden ausführlich diskutiert werden. Anschließend wird diese Diskussion auf mehrdimensionale Nanostrukturen — wie einen Zylinder und einen Ellipsoid — erweitert.

Im letzten Kapitel wird das Ummagnetisierungsverhalten von Leiterbahnen untersucht. Hierbei besteht ein besonderes Interesse an dem Verständnis der auftretenden Ummagnetisierungsmoden in Abhängigkeit von der Leiterbahnbreite, da sie einen Hinweis auf den auftretenden Magnetowiderstand geben. Die in diesem Kapitel gewonnen numerischen Ergebnisse werden mit experimentellen Daten verglichen.

2 Physikalische Grundlagen

In dieser Dissertation wird das thermische Ummagnetisierungsverhalten von Nanostrukturen mit Hilfe von Computersimulationen untersucht. Als Methoden werden hierzu die numerische Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit Langevin-Dynamik, die Monte-Carlo-Methode mit quantifiziertem Zeitschritt sowie eine numerische Methode basierend auf der Theorie des Mikromagnetismus verwendet. Die diesen numerischen Methoden zugrunde liegenden Modelle — wie das klassische Heisenberg-Modell mit langreichweitiger Dipol-Dipol-Wechselwirkung und lokalen Anisotropien, die Theorie des Mikromagnetismus und die Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung — werden in diesem Kapitel vorgestellt.

Ebenfalls werden die theoretischen Grundlagen des Superparamagnetismus präsentiert. Hierbei liegt der Schwerpunkt auf der Beschreibung der charakteristischen Zeit, da es sich hierbei um die relevante Größe zur Beschreibung von thermisch aktivierten Ummagnetisierungsvorgängen handelt.

2.1 Klassisches Spinmodell

Der Ferromagnetismus ist durch eine spontane Ordnung der magnetischen Momente des Festkörpers für Temperaturen unterhalb einer kritischen Temperatur gekennzeichnet. Diese kritische Temperatur entspricht der Curie-Temperatur T_C. Oberhalb dieser Temperaturen verhalten sich die ferromagnetischen Systeme meist paramagnetisch.

Als Ursache für diese spontane Ordnung haben Dirac und Heisenberg 1926 unabhängig voneinander die quantenmechanische Austauschwechselwirkung erkannt. Diese Austauschwechselwirkung kann mit Hilfe des Heisenberg-Modells [51] beschrieben werden. Der entsprechende klassische Heisenberg-Hamiltonian auf einem Gitter lautet

$$\mathcal{H}_J = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \tag{2.1}$$

wobei der klassische Vektor $\mathbf{S}_i = \boldsymbol{\mu}_i/\mu_s$ die dreidimensionalen magnetischen Momente mit Länge 1 repräsentiert. $\mathcal{H}_J$ beschreibt die ferromagnetische Wechselwirkung zwischen benachbarten magnetischen Momenten, wobei $J > 0$ die Kopplungskonstante ist. Die Heisenbergsche Austauschwechselwirkung ist isotrop.

Die Magnetisierung eines Festkörpers weist im allgemeinen in eine bevorzugte Richtung und ist daher nicht isotrop. Diese Brechung der Isotropie wird magnetische Anisotropie genannt. Es werden verschiedene Arten von Anisotropien unterschieden wie beispielsweise die Kristallanisotropie oder magnetokristalline Anisotropie sowie die Form- oder Entmagnetisierungsanisotropie. Die Kristallanisotropie beruht darauf, daß sich die Magnetisierung entlang bevorzugter Kristallachsen ausrichtet, während die Formanisotropie von der makroskopischen Form des Festkörpers abhängt. Die Ursache für die Formanisotropie ist die Dipol-Dipol-Wechselwirkung, während die Spin-Bahn-Kopplung, welche den Spin an das Kristallgitter koppelt, die Ursache für die Kristallanisotropie ist.

Der einfachste Fall einer Kristallanisotropie ist die uniaxiale Anisotropie, die hauptsächlich in dieser Arbeit verwendet wird. Der entsprechende Hamiltonian für eine uniaxiale Anisotropie, die die z-Achse des Systems für positive Anisotropiekonstanten d_z als leichte Achse des Systems bevorzugt, lautet

$$\mathcal{H}_d = -d_z \sum_i S_{i,z}^2. \tag{2.2}$$

Eine weitere Ursache für das Auftreten magnetischer Anisotropien ist, wie schon erwähnt wurde, die langreichweitige magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung,

$$\mathcal{H}_w = -w \sum_{i<j} \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_{i,j})(\mathbf{e}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{i,j}^3}, \tag{2.3}$$

wobei $w = \mu_0 \mu_s^2/(4\pi a^3)$ die Stärke der Dipol-Dipol-Wechselwirkung beschreibt. Bei μ_0 handelt es sich um die sogenannte magnetische Feldkonstante (siehe Tabelle 2.3). In dieser Arbeit wird stets ein kubisches Gitter mit der Gitterkonstanten a betrachtet. $r_{i,j}$ beschreibt die Distanz zwischen den magnetischen Momenten i und j normiert auf die Gitterkonstante a, und $\mathbf{e}_{i,j}$ sind Einheitsvektoren, die in Richtung $\mathbf{r}_{i,j}$ weisen.

Die Wechselwirkung der magnetischen Momente mit einem äußeren angelegten Feld $\mathbf{B}$ mit $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ wird durch

$$\mathcal{H}_B = -\mu_s \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i \tag{2.4}$$

beschrieben. Dieser Beitrag wird minimal, wenn sich die Magnetisierung parallel zum äußeren Feld ausrichtet.

Der Hamiltonian des Systems setzt sich aus der Summe der oben diskutierten Einzelbeiträge zusammen zu

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_J + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_w. \tag{2.5}$$

2.2 Mikromagnetismus

In diesem Kapitel wird die Theorie des Mikromagnetismus vorgestellt, in deren Rahmen eine kontinuumstheoretische Beschreibung ferromagnetischer Materialien vorgenommen wird. In dieser Theorie wird die Magnetisierung durch eine kontinuierliche Funktion des Ortes beschrieben, während im klassischen Heisenberg-Modell die Magnetisierung durch ein magnetisches Moment bzw. durch einen (Punkt)Dipol genähert wird, der einem bestimmten Gitterplatz zugeordnet wird. Die Theorie des Mikromagnetismus hat seit Mitte der 80iger Jahre als Grundlage für numerische mikromagnetische Rechnungen an Bedeutung gewonnen. Es ist erst im Rahmen der ständigen Weiterentwicklung der Rechen- und Speicherleistung der Rechner möglich geworden, detailliertere physikalische Probleme mit Hilfe des Mikromagnetismus numerisch zu untersuchen.

Die Ursprünge des Mikromagnetismus sind auf einen Artikel von Landau und Lifshitz im Jahr 1935 [6] über die Struktur einer Wand zwischen zwei antiparallel ausgerichteten Domänen zurückzuführen, sowie auf verschiedene Arbeiten von William Fuller Brown [52]. Letzterer nannte seine Theorie Mikromagnetismus. Er wollte mit dieser Namensgebung seine Theorie von der klassischen Domänentheorie [52] abgrenzen, in der nur die Energien der antiparallelen Domänen betrachtet werden, und die Wandstruktur vernachlässigt wird. Allerdings ist der Name Mikromagnetismus irreführend, da die mikroskopischen Details der atomistischen Struktur vernachlässigt werden, und das Material als kontinuierlich angenommen, also aus einem makroskopischen Blickwinkel betrachtet wird.

Der Mikromagnetismus erlaubt die Untersuchung von magnetischen Strukturen und magnetischen Ummagnetisierungsprozessen und die Herleitung dafür relevanter Energieterme. Der Mikromagnetismus ist gültig auf Längenskalen, die wesentlich größer als der atomare Gitterabstand aber kleiner als die Domänenwandbreite sind. Die Minimierung der inneren Energie in Abhängigkeit von der Magnetisierung liefert den stabilen Gleichgewichtszustand einer magnetischen Struktur. Die innere Energie E_{U} eines Ferromagneten[1] ist bei vorgegebenen Materialparametern und äußerem Magnetfeld eindeutig gegeben durch das Feld der Magnetisierung $\mathbf{M} = \mathbf{M}(\mathbf{x})$ an jedem Ort $\mathbf{x}$ innerhalb des Ferromagneten[2]. Es ist somit möglich, die Magnetisierungsverteilung $\mathbf{M}(\mathbf{x}) = M_{\mathrm{s}}\mathbf{S}(\mathbf{x})$ zu bestimmen, wobei es sich bei M_{s} um die Sättigungsmagnetisierung handelt, indem die Energie mit geeigneten Methoden minimiert wird.

[1] In den meisten Veröffentlichungen wird mit der Gibbschen freien Energie E_{G} argumentiert. Da in den hier betrachteten Rechnungen keine thermischen Fluktuationen berücksichtigt werden, sind die Gibbsche freie Energie und die inneren Energie identisch, da $E_{\mathrm{G}} = E_{\mathrm{U}} - TS$ mit der Temperatur T und der Entropie S.

[2] Die Magnetisierung ist über die Relation $\mathbf{J} = \mu_0\mathbf{M}$ mit der magnetischen Polarisation $\mathbf{J}$ und über $\mathbf{J} = \mu_0\boldsymbol{\mu}V$ mit dem magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}$ verknüpft. In vielen Veröffentlichungen wird mit der magnetischen Polarisation $\mathbf{J}$ argumentiert.

Gittertyp	c
kubisch	1
kubisch raumzentriert (bcc)	2
kubisch flächenzentriert (fcc)	3
hexagonaldichtgepackt (hcp)	$2\sqrt{2}$

Tabelle 2.1: Auflistung der Werte der Konstanten c, die in Gleichung 2.9 enthalten ist, in Abhängigkeit von der Gitterstruktur [5].

Die innere Energie setzt sich aus verschiedenen Energiebeiträgen zusammen

$$E_{\mathrm{U}} = E_J + E_d + E_B + E_{\mathrm{MS}}, \tag{2.6}$$

die in Kapitel 2.1 für den Fall des klassischen Spinmodells bereits diskutiert wurden. Die einzelnen Energieterme eines Ferromagneten, der im Rahmen der mikromagnetischen Kontinuumstheorie betrachtet wird, können aus denen eines Spinmodells gewonnen werden. Hierzu finden sich in [4, 5] die entsprechenden Herleitungen der einzelnen Energieterme, die im weiteren Verlauf dieses Kapitels zusammenfassend dargestellt werden.

Aus dem Hamiltonian der Austauschenergie für klassische Spins (siehe Gleichung 2.1) kann der Ausdruck für die Austauschenergie E_J,

$$E_J = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos \phi_{i,j} \tag{2.7}$$

gewonnen werden, wobei $\phi_{i,j}$ der Winkel zwischen den magnetischen Momenten $\mathbf{S}_i$ und $\mathbf{S}_j$ ist. Für kleine Winkel $\phi_{i,j}$ kann der $\cos \phi_{i,j} \approx 1 - \phi_{i,j}^2/2$ entwickelt werden. Hierbei ist der konstante Term der Entwicklung nicht relevant, da er nur den Nullpunkt der Energie verschiebt. Für kleine Winkel gilt ebenfalls $|\phi_{i,j}| \approx |\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_j| \approx |(\mathbf{r}_{i,j} \cdot \nabla)\mathbf{S}|$, so daß sich aus Gleichung 2.7

$$E_J \approx \frac{J}{2} \sum_i \sum_{r_{i,j}} ((\mathbf{r}_{i,j} \cdot \nabla)\mathbf{S})^2 \tag{2.8}$$

ergibt. Hierbei ist $\mathbf{r}_{i,j}$ der Abstandsvektor zwischen den magnetischen Momenten $\mathbf{S}_i$ und $\mathbf{S}_j$. Wird nun die Summation ersetzt durch eine Volumenintegration, so ergibt sich der Energieterm in der Kontinuumsnäherung in der Form

$$E_J = \frac{c}{2} \frac{J}{a} \int_V (\nabla \mathbf{S})^2 \mathrm{d}V \tag{2.9}$$

mit der Austauschkonstanten $A_x = cJ/(2a)$. $\mathbf{S}$ ist ein magnetisches Moment[3] der Länge 1 und a ist wieder die Distanz zwischen den nächsten Nachbarn im

[3] $\mathbf{S} = \boldsymbol{\mu}/\mu_{\mathrm{s}} = \mathbf{M}/M_{\mathrm{s}}$, wobei gilt $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{M}V$

Spinmodell. Die Werte der Konstanten c für verschiedene Gittertypen sind in Tabelle 2.1 aufgeführt. Eine ausführliche Beschreibung der Herleitung sowie Diskussion von Gleichung 2.9 findet sich in [5].

Wie schon in Kapitel 2.1 erläutert wurde, spielen magnetokristalline Anisotropien in ferromagnetischen Materialien ein große Rolle. Die Energie der Kristallanisotropie, die für mikromagnetische Rechnungen verwendet wird, hat die Form

$$E_d = -K \int_V S_z^2 \mathrm{d}V, \tag{2.10}$$

die aus dem entsprechenden Anteil des Hamiltonian (siehe Gleichung 2.2) durch die Überführung der Summation in eine Integration gewonnen wird. Ebenfalls auf diese Weise wird der Energieterm, der die Wechselwirkung mit einem äußeren Magnetfeld beschreibt,

$$E_B = -M_\mathrm{s} \int_V \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \mathrm{d}V, \tag{2.11}$$

aus Gleichung 2.4 gewonnen.

Ein weiterer Energieterm ist die magnetostatische Energie oder auch Streufeldenergie E_MS, die daher rührt, daß mit jedem atomaren magnetischen Moment in der Probe ein Magnetfeld verbunden ist, mit welchem alle anderen magnetischen Momente des Systems in Wechselwirkung treten. Das Streufeld $\mathbf{H}_\mathrm{s}$ ist eine Überlagerungen der Magnetfelder aller einzelnen magnetischen Momente in der Probe.

Die magnetostatische Energie eines Gitters aus magnetischen Dipolen, läßt sich gemäß Gleichung 2.3 als

$$E_h = -\frac{\mu_0}{2} \sum_i \boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{h}_i, \tag{2.12}$$

wobei $\mathbf{h}_i$ die Feldstärke am Gitterplatz i ist, die aufgrund der Wechselwirkung mit allen anderen Dipolen entsteht, und $\boldsymbol{\mu}_i$ das magnetische Moment auf dem Gitterplatz i ist.

Zur Bestimmung von E_h ist es notwendig, die Gestalt von $\mathbf{h}_i$ zu kennen. Aus diesem Grund wird diese Feldstärke nun sowohl für den diskreten als auch für den Kontinuumsfall näher untersucht. Hierzu wird um den Gitterplatz i eine Kugel gelegt, deren Radius groß gegen die Gitterkonstante a des Materials ist, aber klein genug, so daß die Magnetisierung innerhalb der Kugel homogen ist. Dieser Sachverhalt ist in der Abbildung 2.1 zweidimensional skizziert. Das Feld $\mathbf{h}_i$ setzt sich dann aus dem Feld $\mathbf{h}_i^\mathrm{I}$, daß aufgrund der Wechselwirkung innerhalb der Kugel besteht, und dem Feld $\mathbf{h}_i^\mathrm{A}$, daß aufgrund der Wechselwirkungen im Außenraum entsteht, zusammen. Eine detailierte Beschreibung dieses Problems findet sich in [5].

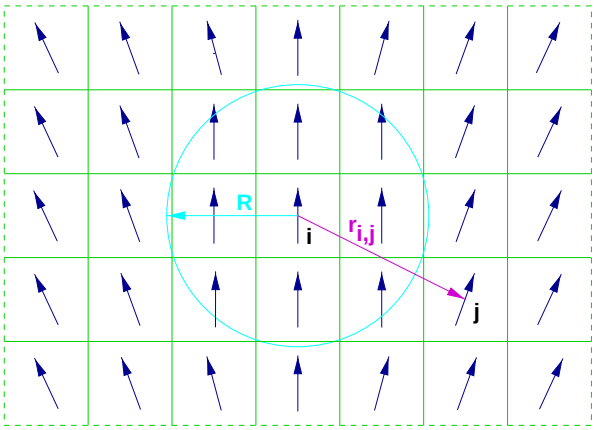


Abbildung 2.1: Dargestellt ist ein zweidimensionaler Ausschnitt aus einem dreidimensionalen Gitter, welches aus magnetischen Dipolen besteht. Um den Dipol auf dem Gitterplatz i wird eine Kugel mit dem Radius R gelegt. Die Dipole innerhalb der Kugel sind parallel zueinander ausgerichtet.

Zunächst wird der diskrete Fall diskutiert, in welchem angenommen wird, daß sich auf jedem Gitterplatz ein magnetisches Moment befindet. Die magnetischen Momente, die sich innerhalb der Kugel mit dem Radius R befinden, seien nahezu parallel angeordnet. Für diesen Fall hat das Dipolfeld die folgende Form

$$\mathbf{h}_i^{\mathrm{d,I}} \sim \sum_{r_{i,j}<R} \left(\frac{3\mathbf{r}_{i,j}(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{r}_{i,j})}{r_{i,j}^5} - \frac{\boldsymbol{\mu}_j}{r_{i,j}^3} \right), \tag{2.13}$$

wobei $\mathbf{r}_{i,j} = (x_{i,j}, y_{i,j}, z_{i,j})$ der Abstandsvektor $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_\mathrm{j} - \mathbf{r}_\mathrm{i}$ ist. Für die x-Komponente des Feldes ergibt sich

$$h_{i,x}^{\mathrm{d,I}} \sim \sum_{r_{i,j}<R} \left(\frac{3x_{i,j}(\mu_j^x x_{i,j} + \mu_j^y y_{i,j} + \mu_j^z z_{i,j})}{r_{i,j}^5} - \frac{\mu_j^x}{r_{i,j}^3} \right). \tag{2.14}$$

Da sich die gemischten Terme aus Symmetriegründen aufheben und die folgende Beziehung in kubischen Systemen gilt

$$\sum \frac{x_{i,j}^3}{r_{i,j}^5} = \sum \frac{y_{i,j}^3}{r_{i,j}^5} = \sum \frac{z_{i,j}^3}{r_{i,j}^5} = \frac{1}{3} \sum \frac{1}{r_{i,j}^3}, \tag{2.15}$$

ist das Dipolfeld im Zentrum der Kugel Null[4]. Im diskreten Fall setzt sich das Streufeld $h_{i,x}^{\mathrm{d}}$ nur noch aus dem Feld $h_{i,x}^{\mathrm{d,A}}$ zusammen, das durch die Dipolfelder

[4]Diese Überlegungen sind in nicht kubischen Systemen komplizierter, stimmen dort aber ebenfalls. Es ergibt sich eine zusätzliche Konstante, die die Kristallstruktur beinhaltet und die zu den Anisotropietermen addiert werden kann.

im Außenraum entsteht. Diese Betrachtungen gelten analog für die y- und z-Komponenten des Feldes, so daß für das Streufeld allgemein gilt: $\mathbf{h}_i^{\mathrm{d}} = \mathbf{h}_i^{\mathrm{d,A}}$.

Nun wird der Fall des Kontinuums betrachtet. Da angenommen wurde, daß die magnetischen Momente innerhalb der Kugel nahezu parallel angeordnet sind, kann das Streufeld innerhalb dieser Kugel näherungsweise durch das Entmagnetisierungsfeld einer homogen magnetisierten Kugel, $-\mathbf{M}/3$ [53, 54] beschrieben werden. Der Raum außerhalb der Kugel wird nun in Kuben unterteilt. Im Nahfeld unterscheiden sich die Streufelder von Dipolen und Kuben, während sie im Fernfeld näherungsweise gleich sind, das heißt also $\mathbf{h}_i^{\mathrm{k,A}} = \mathbf{h}_i^{\mathrm{d,A}}$. Letzteres folgt aus einer Multipolentwicklung. Für das gesamte Streufeld ergibt sich dementsprechend

$$\mathbf{h}_i^{\mathrm{k}} = \mathbf{h}_i^{\mathrm{k,I}} + \mathbf{h}_i^{\mathrm{k,A}} = -\frac{1}{3}\mathbf{M} + \mathbf{h}_i^{\mathrm{d,A}}. \tag{2.16}$$

Die zugehörigen Energien ergeben sich aus den Streufeldern mit Hilfe der Beziehung

$$E = -\frac{\mu_0}{2}\int_V \mathbf{M}\cdot\mathbf{h}_i \mathrm{d}V, \tag{2.17}$$

im diskreten Fall zu

$$E^{\mathrm{d}} = -\frac{\mu_0}{2}\int_V \mathbf{M}\cdot\mathbf{h}_i^{\mathrm{d}}\mathrm{d}V = -\frac{\mu_0}{2}\int_V \mathbf{M}\cdot\mathbf{h}_i^{\mathrm{d,A}}\mathrm{d}V \tag{2.18}$$

und im Kontinuumsfall zu

$$E^{\mathrm{k}} = -\frac{\mu_0}{2}\int_V \mathbf{M}\cdot\mathbf{h}_i^{\mathrm{k}}\mathrm{d}V = -\frac{\mu_0}{2}\int_V \Big(-\frac{1}{3}\mathbf{M}\cdot\mathbf{M} + \mathbf{M}\cdot\mathbf{h}_i^{\mathrm{d,A}}\Big)\mathrm{d}V. \tag{2.19}$$

Ein Vergleich der Energien miteinander,

$$E^{\mathrm{d}} - E^{\mathrm{k}} = -\frac{\mu_0}{2}\int_V \frac{1}{3}M_{\mathrm{s}}^2\mathrm{d}V = \text{konstant}, \tag{2.20}$$

verdeutlicht, daß sich die Energien nur um eine Konstante unterscheiden. Diese ist nicht relevant, da sie nur den Nullpunkt der Energie verschiebt. Die Energie der Dipol-Dipol-Wechselwirkung entspricht also — bis auf eine Konstante — im kontinuierlichen Fall der magnetostatischen Energie

$$E_{\mathrm{MS}} = -\frac{\mu_0}{2}\int_V \mathbf{M}\cdot\mathbf{H}_{\mathrm{s}}\mathrm{d}V, \tag{2.21}$$

wobei es sich bei $\mathbf{H}_{\mathrm{s}}$ um das Streufeld der kontinuierlichen Magnetisierungsverteilung handelt.

Der Hamiltonian (siehe Gleichung 2.5) wird in dieser Dissertation an einigen Stellen (siehe Kapitel 4.1, 4.2, 4.3 und 6) interpretiert als eine Diskretisierung des Kontinuumsmodells auf einem kubischen Gitter mit der Gitterkonstanten

Transformationen	Materialparameter	Co	Fe
$J = 2A_x a$	Austauschkonstante A_x [J/m]	$1.3 \cdot 10^{-11}$	$4.2 \cdot 10^{-11}$
$d_z = Ka^3$	Anisotropiekonstante K [J/m^3]	$6.8 \cdot 10^5$	$3.2 \cdot 10^4$
$\mu_\mathrm{s} = M_\mathrm{s} a^3$	Sättigungsmagnetisierung M_s [A/m]	$1.43 \cdot 10^6$	$1.714 \cdot 10^6$

Tabelle 2.2: Die Transformation auf die Materialparameter, die in Kontinuumsmodellen verwendet werden, sowie die Materialparameter von Co und Fe sind aufgeführt.

a. Die Transformationen auf die Materialparameter, die gewöhnlich in Kontinuumsmodellen verwendet werden, und die Materialparameter von Co und Fe sind in Tabelle 2.2 aufgeführt. Diese Transformationen ergeben sich aus einem Vergleich der Vorfaktoren der Wechselwirkungsenergien (siehe Gleichung 2.1 und 2.9) sowie der Anisotropieenergien (siehe Gleichung 2.2 und 2.10) miteinander.

2.3 Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung

Die Bewegungsgleichung, die die Präzessionsbewegung eines Elektrons in einem äußeren Feld beschreibt, läßt sich aus der quantenmechanischen Heisenbergschen Bewegungsgleichung,

$$i\hbar \frac{\partial \langle \tilde{\mathbf{s}}(t) \rangle}{\partial t} = \langle [\tilde{\mathbf{s}}(t), \tilde{\mathcal{H}}] \rangle, \tag{2.22}$$

herleiten. Wie im Stern-Gerlach-Experiment (1922) nachgewiesen wurde, besitzt ein Elektron einen inneren Drehimpuls, der üblicherweise als Spin bezeichnet wird. Dieser innere Drehimpuls wird in Gleichung 2.22 durch den Spin-(Drehimpuls)operator $\tilde{\mathbf{s}}(t)$ beschrieben. Für die Herleitung werden die Vertauschungsregeln für Drehimpulsoperatoren, wie beispielsweise

$$[\tilde{s_x}(t), \tilde{s_y}(t)] = i\hbar \tilde{s_z}(t) \text{ und zyklisch}, \tag{2.23}$$

sowie eine Entwicklung des Kommutators $\left[\tilde{\mathbf{s}}(t), \tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{s}}(t))\right]$ nach $\hbar$,

$$\left[\tilde{\mathbf{s}}(t), \tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{s}}(t))\right] = i\hbar \left(\tilde{\mathbf{s}}(t) \times \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{s}}} \right) \tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{s}}(t)) + \mathcal{O}(\hbar^2), \tag{2.24}$$

benutzt[5]. Hierbei wird angenommen, daß sich der Hamiltonoperator $\tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{s}}(t))$ aus einem Polynom bestehend aus Drehimpulsoperatoren $\tilde{\mathbf{s}}$ zusammensetzt.

[5] Letztere Vertauschungsregel gilt nicht nur für einen Hamiltonoperator $\tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{s}}(t))$, sondern allgemein für beliebige Operatoren $\mathbf{\Omega}(\tilde{\mathbf{s}}(t))$, die sich aus Drehimpulsoperatoren zusammensetzen.

Konstante		
gyromagnetisches Verhältnis	γ	1.76×10^{11} 1/Ts
Bohrsches Magneton	μ_{B}	9.274×10^{-24} J/T
Landé Faktor	g	2.0023 (hier für freie Elektronen)
Boltzmann Konstante	k_{B}	1.3807×10^{-23} J/K
magnetische Feldkonstante	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$ Vs/Am

Tabelle 2.3: Auswahl einiger physikalischer Konstanten [55], die unter anderem in Gleichung 2.26, Gleichung 2.27 und Gleichung 2.30 benötigt werden.

Die so erhaltene Bewegungsgleichung hat die folgende Form,

$$i\hbar \frac{\partial \langle \tilde{\mathbf{s}}(t) \rangle}{\partial t} = -i\hbar \langle \Big(\tilde{\mathbf{s}}(t) \times \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{s}}} \Big) \tilde{\mathcal{H}} \rangle + \mathcal{O}(\hbar^2). \tag{2.25}$$

Diese quantenmechanische Bewegungsgleichung geht für $\hbar \to 0$ in den klassischen Grenzfall über

$$\frac{\partial \mathbf{s}_i}{\partial t} = -\Big(\mathbf{s}_i \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{s}_i} \Big) \mathcal{H}(\mathbf{s}_i), \tag{2.26}$$

wobei die Erwartungswerte in klassische Größen übergehen gemäß $\mathbf{s} = \langle \tilde{\mathbf{s}} \rangle$ und $\mathcal{H} = \langle \tilde{\mathcal{H}} \rangle$ (Ehrenfestsches Theorem).

Der Spin $\mathbf{s}$ ist mit dem magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}$ über $\mathbf{s} = \boldsymbol{\mu}/\gamma$ verknüpft, wobei $\gamma = g\mu_{\mathrm{B}}/\hbar$ das gyromagnetische Verhältnis, μ_{B} das Bohrsche Magneton und g der Landé Faktor ist. Die Zahlenwerte dieser Konstanten sind in Tabelle 2.3 aufgeführt. Im Fall des Elektrons ist der Drehimpuls oder Spin wegen der negativen Elektronenladung stets antiparallel zum magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}$ orientiert[6], d. h. daß γ negativ ist. Im Verlauf dieser Arbeit wird γ stets in dem Sinne verwendet, daß es sich dabei um den Betrag des gyromagnetischen Verhältnisses handelt.

Diese klassische Bewegungsgleichung 2.26 wurde von Gilbert [57] um einen phänomenologischen Reibungsterm erweitert, der die Ankopplung an ein Wärmebad berücksichtigt. Die dimensionslose Dämpfungskonstante α beschreibt phänomenologisch die Stärke der Ankopplung an ein Wärmebad. Die experimentell bestimmten Werte für die Dämpfungskonstante liegen unterhalb von Eins [12, 41]. Eine theoretische Bestimmung der Dämpfungskonstante liegt allerdings nicht vor. Diese phänomenologischen Betrachtungen führen auf die sogenannte Gilbert-Gleichung,

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_{\mathrm{s}}} \mathbf{S}_i \times (\mathbf{H}_i - \frac{\alpha \mu_{\mathrm{s}}}{\gamma} \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t}), \tag{2.27}$$

[6] Man beachte, daß in [56] gezeigt wird, daß es sich bei den hier betrachteten magnetischen Momenten, die in ferromagnetischen Materialien durch den Drehimpuls des Elektrons verursacht werden, um (Punkt-)Dipolmomente handelt.

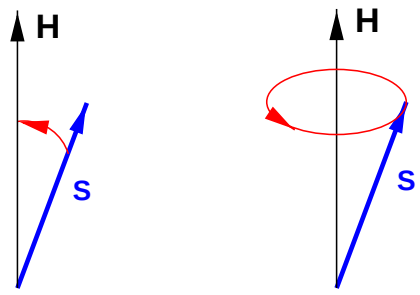


Abbildung 2.2: In der linken Skizze ist der Relaxationsprozeß eines einzelnen magnetischen Spins **S** in einem äußeren Feld **H** dargestellt. In der rechten ist der entsprechende Präzessionsprozeß skizziert.

wobei $\mathbf{H}_\mathrm{i} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i}$ ein effektives Feld, in welchem das Elektron präzediert und $\mathbf{S}_i = \boldsymbol{\mu}_i/\mu_\mathrm{s}$ ein magnetisches Moment ist. Diese Gleichung ist äquivalent zur Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung, deren Herleitung aus der Gilbert-Gleichung im folgenden vorgestellt wird. Zunächst wird die Gilbert-Gleichung 2.27 auf beiden Seiten mit $\mathbf{S}_i\times$ erweitert, so daß sich nach Anwendung des Entwicklungssatzes[7] die folgende Gleichung ergibt,

$$\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_\mathrm{s}} \mathbf{S}_i \times (\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i) - \alpha \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t}. \tag{2.28}$$

Dieser Ausdruck wird nun mit der nach $\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t}$ aufgelösten Gleichung 2.27,

$$\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = \frac{1}{\alpha}\Big(\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} + \frac{\gamma}{\mu_\mathrm{s}} \mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i\Big), \tag{2.29}$$

gleich gesetzt. Die auf diese Art und Weise erhaltene Beziehung führt durch einfache Umformungen direkt auf die Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung [6]

$$\frac{(1+\alpha^2)\mu_s}{\gamma} \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\mathbf{S}_i \times \Big(\mathbf{H}_i + \alpha(\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i)\Big). \tag{2.30}$$

Der erste Term der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung beschreibt die Präzession eines magnetischen Moments mit der Präzessionszeit τ_Prae. Unter der Relaxationszeit wird die Zeit verstanden, die das magnetische Moment benötigt, um von einem metastabilen Zustand in einen lokalen Gleichgewichtszustand zu relaxieren. Dieser Prozeß wird von dem zweiten Term der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung beschrieben. In Abbildung 2.2 ist sowohl die Präzession als auch die Relaxation skizziert. Diese Bewegungsgleichung läßt sich für den simplen Fall eines einzelnen magnetischen Moments in einem äußeren Magnetfeld

[7] $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{ac})\mathbf{b} - (\mathbf{ab})\mathbf{c}$

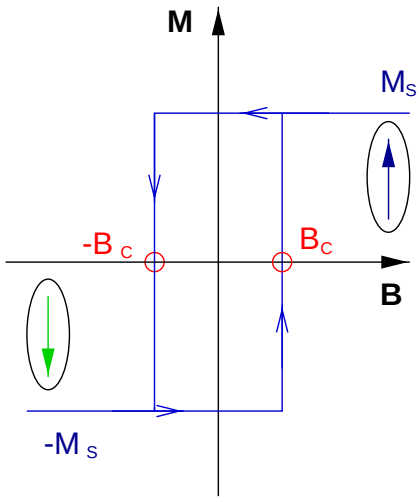


Abbildung 2.3: Skizze einer Rechteckhysterese.

analytisch lösen. In diesem Fall wird nur der Anteil $\mathcal{H}_B$ der Hamiltonfunktion (siehe Gleichung 2.5) berücksichtigt. Die Lösung führt auf die Präzessionszeit $\tau_{\text{Prae}} = 2\pi(1+\alpha^2)/\gamma B_z$ und auf die Relaxationszeit $\tau_{\text{Rel}} = \tau_{\text{Prae}}/\alpha$. Für kompliziertere Systeme läßt sich diese Gleichung nicht mehr einfach analytisch lösen, sondern nur mit der Hilfe numerischer Verfahren. In Kapitel 3.1 wird beschrieben, wie diese Gleichung mittels eines numerischer Verfahren gelöst wird, und in Kapitel 4.2 werden die numerischen Ergebnisse vorgestellt, die für ein komplizierteres System erhalten werden.

2.4 Ummagnetisierungsprozesse und Superparamagnetismus

Das Ummagnetisierungsverhalten von Partikeln, die klein sind im Vergleich zur Domänenwandbreite $\delta = \sqrt{J/(2d)}$ [4, 58], wird im folgenden diskutiert [4]. In solchen Partikeln ist es energetisch ungünstig, daß sie in Domänenstrukturen zerfallen. Es bilden sich energetisch günstigere Einzeldomänenzustände aus, so daß diese Art von Partikeln als eindomänige Partikel bezeichnet werden.

Ein eindomäniges Partikel kann unter Umständen im wesentlichen zwei mögliche Zustände einnehmen, den aufmagnetisierten und den abmagnetisierten Zustand, die durch eine Energiebarriere ΔE voneinander getrennt sind (vgl. Abbildung 1.1). Das Partikel soll sich ersteinmal in dem aufmagnetisierten Zustand befinden, wo es die Sättigungsmagnetisierung M_s besitzt. Nun wird ein Gegenfeld $\mathbf{B}$ angelegt und solange erhöht, bis das System aufgrund dieses Magnetfelds die Energiebarriere überwinden und in seinen abwärtsmagnetisierten Zustand mit der Sättigungsmagnetisierung $-M_\text{s}$ gelangen kann. Als Koerzitivfeld B_c

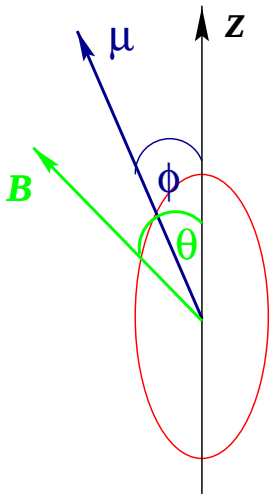


Abbildung 2.4: Skizze eines Stoner-Wohlfarth-Partikels. Die leichte Achse des Systems ist die z-Achse. Der Winkel zwischen dem magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{M}V$ und der leichten Achse ist ϕ. θ ist der Winkel, unter dem das Magnetfeld $\mathbf{B}$ zur leichten Achse steht.

wird der Wert des Magnetfeldes bezeichnet, bei dem die Magnetisierung Null wird (siehe Abbildung 2.3).

Die erste theoretische Beschreibung eines solchen nicht thermischen Ummagnetisierungsprozesses eines eindomänigen Partikels stammen von Stoner und Wohlfahrt (siehe Abbildung 2.4) [7]. Hierbei wird nur die Wechselwirkung des Partikels mit einem äußeren angelegten Magnetfeld sowie eine uniaxiale Anisotropie berücksichtigt. Die entsprechende zugehörige Energie ergibt sich zu

$$E = KV\cos^2(\phi) - M_\mathrm{s}BV\cos(\phi - \theta), \tag{2.31}$$

unter der Annahmen, daß die Anisotropieachse, das Magnetfeld und das magnetische Moment in einer Ebene liegen, wobei θ der Winkel zwischen der leichten Achse des Partikels und dem äußeren angelegten Magnetfeld $\mathbf{B}$ und ϕ der Winkel zwischen der leichten Achse und dem zugehörigen magnetischen Moment $\boldsymbol{\mu}$ ist. Es wird angenommen, daß das äußere Magnetfeld parallel zur leichten Achse liegt, also $B = B_z\hat{\mathbf{z}}$ gilt, so daß der Winkel θ herausfällt. Die Suche nach den Extrema der Energie ($\frac{dE}{d\phi} = 0$) liefert zwei Minima bei $\phi = 0°$ und $\phi = 180°$ sowie ein Maximum bei $\cos(\phi) = -\frac{M_\mathrm{s}B_z}{2K}$. Damit das Partikel von einem Energieminimum in das andere gelangen kann, muß es die Energiebarriere ΔE_cr überwinden,

$$\Delta E_\mathrm{cr} = KV(1-h)^2, \tag{2.32}$$

wobei $h = \frac{M_\mathrm{s}B_z}{2K}$ ist. Aus dieser Beziehung läßt sich dann über die Bedingung $\Delta E_\mathrm{cr}(B_\mathrm{c}) = 0$ das Koerzitivfeld B_c bestimmen, das sich ergibt zu

$$B_\mathrm{c} = \frac{2K}{M_\mathrm{s}}. \tag{2.33}$$

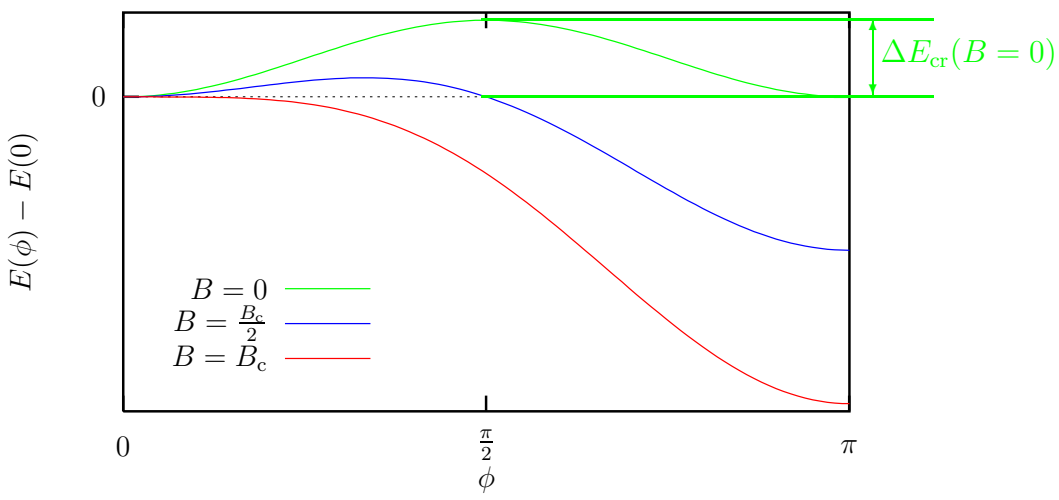


Abbildung 2.5: Energie eines Stoner-Wohlfarth-Partikels in Abhängigkeit vom Winkel ϕ für verschiedene Magnetfelder B. Die Energiebarriere ΔE_{cr} ist exemplarisch für den Fall $B = 0$ eingezeichnet.

Für den Fall, daß das Magnetfeld nicht parallel zur leichten Achse ist ($\theta \neq 0°$), lassen sich die Koerzitivfelder nur noch numerisch über den sogenannten Stoner-Wohlfarth-Asteroiden bestimmen [4, 5]. Beispielsweise ist das Koerzitivfeld für einen Winkel $\theta = 45°$ nur halb so groß wie für $\theta = 0°$.

In der Abbildung 2.5 ist der Energieverlauf $E(\phi)$ für verschiedene Magnetfeldstärken B dargestellt. In Abhängigkeit vom angelegten Feld ändert sich die Energiebarriere, die die beiden Zustände voneinander trennt. Wenn das äußere angelegt Magnetfeld größer ist als das Koerzitivfeld ($B \geq B_{\mathrm{c}}$), fällt die Energiebarriere weg, so daß das System sofort ummagnetisiert. In diesem Fall findet also ein nicht thermischer Ummagnetisierungsprozeß statt.

Im Fall $B < B_{\mathrm{c}}$ bleibt die Energiebarriere erhalten, so daß das System ohne thermische Fluktuationen nicht ummagnetisieren kann. Erst bei endlichen Temperaturen T, kann daß System ummagnetisieren. Hierbei handelt es sich um thermisch aktivierte Ummagnetisierungsprozesse. Die Zeit, die das System benötigt, um aus seinem metastabilen Zustand in den stabilen Zustand zu relaxieren, wird in der Literatur als charakteristische Zeit oder *escape time* bezeichnet. Diese Zeitskala ist die grundlegende Größe, mit deren Hilfe thermisch aktivierte Ummagnetisierungsprozesse charakterisiert werden können. Im folgenden werden die theoretischen Überlegungen zur Bestimmung dieser Größe historisch dargestellt.

Néel hat 1949 vorgeschlagen [8], daß die Relaxationszeit τ beschrieben werden

kann durch ein Arrhenius Gesetz gemäß

$$\tau = f_0 \exp \frac{\Delta E}{k_\mathrm{B} T}. \tag{2.34}$$

Néel nahm zunächst an, daß es sich bei f_0 um eine Konstante handelt, die sogenannte *attempt frequency*. Im folgenden wird die *escape time* ausführlich diskutiert, und es wird gezeigt, daß es sich bei der *attempt frequency* nicht um eine Konstante, sondern um komplizierte Funktionen handelt, die unter anderem von der Temperatur, der Dämpfungskonstante, den Anisotropien, der Systemgröße und dem äußeren angelegten Magnetfeld abhängen.

Im Jahr 1963 befaßte sich Brown [9] mit der Berechnung der charakteristischen Zeit. Für seine Überlegungen betrachtet er ein Ensemble von isolierten magnetischen Momenten mit uniaxialer Anisotropie, die sich in einem äußeren Magnetfeld befinden. Dieses System wird beschrieben durch $\mathcal{H} = \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_d$ (siehe Gleichung 2.5) für einen einzelnen klassischen Spin mit $\mathbf{B} = B_z \hat{\mathbf{z}}$ und der Anisotropiekonstante $d_z > 0$, so daß die z-Achse des Systems die leichte Achse ist. Ein Spin entspricht einem magnetischen Moment des gesamten Partikels, welches so klein ist, daß es immer homogen magnetisiert ist. Diese Annahmen entsprechen denen des zuvor beschriebenen Stoner-Wohlfarth-Modells zur Beschreibung eines nicht thermischen Unmagnetisierungsprozesses. In diesem einfachen Fall ist die Energie nur eine Funktion des Winkels ϕ zwischen der leichten z-Achse und dem magnetischen Moment, so daß die Energie durch Gleichung 2.31 beschrieben werden kann. Die Energiebarriere, die mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit, also auf einer gewissen Zeitskala, aufgrund von thermischen Fluktuationen überwunden werden kann, wird durch Gleichung 2.32 beschrieben.

Browns Überlegungen orientieren sich an der Langevin-Gleichung, die eine phänomenologische Beschreibung der Brownschen[8] Bewegung darstellt[9]. Da sowohl in der Gilbert-Gleichung 2.27 als auch in der Landau-Lifshitz-Gleichung 2.30 keine thermischen Fluktuationen berücksichtigt werden, erweiterte Brown (in Anlehnung an die Langevin-Gleichung) das innere Feld $\mathbf{H}_\mathrm{i}$ um ein zeitabhängiges Rauschen $\boldsymbol{\zeta}_i(t)$,

$$\mathbf{H}_i'(t) = \boldsymbol{\zeta}_i(t) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i}, \tag{2.35}$$

[8] Um Verwirrungen im Laufe dieser Arbeit zu vermeiden, stelle ich die drei Browns vor, die im Verlauf dieser Arbeit erwähnt werden: Der Botaniker Robert Brown hat 1827 die Brownsche Molekularbewegung beobachtet. Die theoretischen Überlegungen zur Bestimmung der charakteristischen Zeit eines magnetischen eindomänigen Partikels stammen von William Fuller Brown (1963) und das Ummagnetisierungsverhalten von Spinketten wurde von Hans-Benjamin Braun (um 1993) theoretisch beschrieben.

[9] Bewegung eines hinreichend kleinen Teilchens, welches in einer Flüssigkeit eingetaucht ist und Zufallsbewegungen ausführt. Eine detailierte Beschreibung der Brownschen Bewegung und eine Herleitung der Langevin-Gleichung findet sich beispielsweise in [59].

um so die thermischen Fluktuationen zu berücksichtigen [9]. Das thermische Rauschen wird durch

$$\langle \boldsymbol{\zeta}_i(t) \rangle = 0 \quad \text{und} \tag{2.36}$$

$$\langle \zeta_i^\eta(t) \zeta_j^\theta(t') \rangle = 2 \, \frac{\alpha \mu_\mathrm{s}}{\gamma} \, k_\mathrm{B} T \, \delta_{i,j} \, \delta_{\eta,\theta} \, \delta(t - t') \tag{2.37}$$

charakterisiert, wobei i, j Gitterplätze repräsentieren und η, θ kartesische Koordinaten bezeichnen. Die auf diese Art und Weise gewonnene Gleichung ist die sogenannte Landau-Lifshitz-Gilbert-Bewegungsgleichung mit Langevin-Dynamik. Hierbei handelt es sich um eine stochastische Bewegungsgleichung, die mittels numerischer Verfahren gelöst werden kann, die in Kapitel 3.1 vorgestellt werden.

Ausgehend von einer Ausgangskonfiguration können aufgrund des weißen Rauschens[10] unterschiedliche Trajektorien im Phasenraum beschrieben werden. Um eine vernünftige Beschreibung dieser Systeme zu erhalten, müssen Mittelwerte berechnet werden. Die Fokker-Planck-Gleichung liefert die Grundlage zur statistischen Beschreibung von Ensemblen von Systemen, wobei die einzelnen Systeme durch die Langevin-Gleichung beschrieben werden. Die Fokker-Planck-Gleichung beschreibt die Zeitentwicklung der Nichtgleichgewichts-Wahrscheinlichkeitsverteilung der Richtungen der magnetischen Momente im Phasenraum [61] und bildet die Grundlage für Browns [9] theoretische Überlegungen. Mit ihrer Hilfe wird die *escape rate* im Limes tiefer Temperaturen für einfache magnetische Systeme gewonnen. Die *escape rate* ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Partikel aufgrund von thermischen Fluktuationen den metastabilen Zustand verlassen kann. Sie folgt aber auch aus dem Fluß des Wahrscheinlichkeitsstroms über die Energiebarriere. Diese Überlegungen stammen aus der Übergangstheorie von Kramer [62], der die Bewegung von Partikeln beschrieben hat und wurde von Brown [9] auf magnetische Partikel übertragen.

Brown geht also für seine Überlegungen von der Langevin-Gleichung aus und konstruiert daraus die zugehörige Fokker-Planck-Gleichung. Aus dieser Gleichung hat er dann anschließend für den Grenzfall tiefer Temperaturen die sogenannte *escape time* τ bestimmt. Dies ist die mittlere Zeit, die von den magnetischen Momenten des Systems benötigt wird, um die Energiebarriere zu überwinden. Im Grenzfall tiefer Temperaturen beziehungsweise hoher Ener-

[10] Die Korrelationszeit des Rauschprozesses $R(t)$ ist verschwindend klein im Vergleich zur Zeitskala der ungestörten Bewegung. Dies wird durch die Gleichung $\langle R(t)R(t') \rangle = g\delta(t - t')$ ausgedrückt. Die Bezeichnung weißes Rausch rührt daher, daß die schwankende Größe $R(t)$ eine frequenzunabhängige Spektraldichte besitzt. Der Begriff Weiß wurde in Anlehnung an weißes Licht gewählt, in welchem alle Frequenzen gleichmäßig vertreten sind. [59, 60]

giebarrieren gehorcht diese einem thermischen Aktivierungsgesetz

$$\tau = \tau_{\mathrm{cr}} \exp \frac{\Delta E_{\mathrm{cr}}}{k_{\mathrm{B}} T}. \tag{2.38}$$

Der Vorfaktor τ_{cr} und die Energiebarriere ΔE_{cr} hängen von dem auftretenden Ummagnetisierungsmode ab. Brown hat in seiner Arbeit den Vorfaktor τ_{cr} für ein axial-symmetrisches Potential im Grenzfall $\Delta E_{\mathrm{cr}} \gg k_{\mathrm{B}} T$ und hoher Dämpfung bestimmt [9],

$$\begin{aligned} \tau_{\mathrm{cr}} &= \frac{1+\alpha^2}{\alpha\gamma} \frac{1}{B_{\mathrm{c}}} \sqrt{\frac{k_{\mathrm{B}} T}{KV(1-h)^2}} \frac{\pi}{1-h^2} \\ &= \tau_{\mathrm{Rel}} \sqrt{\frac{E_{\mathrm{therm}}}{\Delta E_{\mathrm{cr}}}} \frac{\pi}{1-h^2}. \end{aligned} \tag{2.39}$$

Die Formel setzt sich bis auf einen Faktor zusammen aus der Relaxationszeit τ_{Rel} eines einzelnen magnetischen Moments in einem Magnetfeld ohne Temperatur (siehe Kapitel 2.3) und dem Verhältnis der thermischen Energie E_{therm} zur Energiebarriere ΔE_{cr} (siehe Gleichung 2.32) eines Teilchens im Magnetfeld. Die im späteren Verlauf der Arbeit verwendeten Vorfaktoren besitzen häufig eine ähnliche Gestalt. Zumindest ist allen gemeinsam, daß sie die Relaxationszeit in einem Feld[11] beinhalten.

In letzter Zeit wurden die Vorfaktoren von unterschiedlichen Autoren für diverse andere Modelle berechnet. Klik und Gunther haben basierend auf der Arbeit von Brown ebenfalls ein axial-symmetrisches Modell betrachtet und die Vorfaktoren für die Grenzfälle der niedrigen, mittleren und hohen Dämpfung bestimmt [10]. Braun berechnete den Vorfaktor ebenfalls basierden auf den Arbeiten von Brown für ein Modell mit harter Achse [11], und in der Gruppe von Coffey wurden die Vorfaktoren für unterschiedliche Bereiche der Dämpfung [42] bestimmt. Sie haben ebenfalls nicht-axial symmetrische Modelle untersucht, wo das äußere Magnetfeld nicht parallel zur leichten Achse angelegt wird, sondern unter einem Winkel dazu [12, 41, 63]. Diese letzteren theoretischen Überlegungen wurden zum Teil durch experimentelle Untersuchungen [17] bestätigt.

Die *escape time* τ eines eindomänigen ferromagnetischen Partikels hängt von den Materialparametern, der Temperatur, der Systemgröße sowie dem äußeren Magnetfeld ab. Im folgenden wird nun diese Zeit τ mit einer experimentellen Meßzeit t_{exp} verglichen. Anhand dieses Vergleichs kann der sogenannte Superparamagnetismus erläutert werden, dessen Kenntnis für die magnetische Datenspeicherung von großer Bedeutung ist.

[11] Bei diesem Feld handelt es sich nicht unbedingt um das äußere Magnetfeld, sondern auch um Anisotropiefelder.

Im Fall $t_{\text{exp}} \ll \tau$ ändert sich die Magnetisierung während der Meßzeit nicht. In diesem Bereich wird von einem stabilen Ferromagneten gesprochen. Gilt nun aber $t_{\text{exp}} \gg \tau$, so kann sich die Magnetisierung während der Meßzeit wiederholt ändern, was dem Verhalten eines konventionellen Paramagneten entspricht. Zeigt ein Partikel dieses Verhalten, wird es als superparamagnetisch bezeichnet [5, 56]. Der Superparamagnetismus tritt wegen der Volumenabhängigkeit der Energiebarriere 2.31 in kleinen ferromagnetischen Partikeln auf und ist dadurch gekennzeichnet, daß das Partikel thermisch nicht stabil ist und spontan (auch mehrfach) ummagnetisieren kann. Neben der Ausdehnung des Partikels spielt auch die Temperatur eine große Rolle (vgl. Gleichung 2.38). Die Temperatur, bei der der Übergang in den Superparamagnetismus stattfindet, wird als *blocking* Temperatur bezeichnet.

Für die magnetische Datenspeicherung bedeutet dieses bei Verwendung superparamagnetischer Partikel also den spontanen Verlust der gespeicherten Daten, die eigentlich mehrere Jahre erhalten bleiben sollten. Um diesen Effekt zu vermeiden, muß bei der Verwendung möglichst kleiner Partikel zum Erzielen großer Speicherkapazitäten berücksichtigt werden, daß die Partikelgröße nicht das sogenannte superparamagnetische Limit unterschreitet. Dieses stellt also die natürliche Grenze für die Miniaturisierung im Bereich der magnetischen Datenspeicher dar.

3 Numerische Methoden

Für die Untersuchung der Dynamik von Spinsystemen spielt die Kenntnis der physikalischen Zeitskala eine große Rolle. Aus diesem Grund werden zur numerischen Untersuchung solcher Prozesse Methoden verwendet, die auf der numerischen Lösung der Fokker-Planck- oder Langevin-Gleichung beruhen. Der Vorteil dieser Methoden besteht darin, daß sie in direkter Beziehung zur physikalischen Zeit stehen.

Eine andere relativ neue Methode, die zur numerischen Untersuchung von dynamischen Prozessen herangezogen werden kann, ist eine Monte-Carlo-Methode mit einem sogenannten quantifizierten Zeitschritt. Dieser Schritt ermöglicht die Abbildung der Zeitskala der Langevin-Dynamik auf die der Monte-Carlo-Methode, die für gewöhnlich keine physikalische Zeitinterpretation besitzt.

Ein wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit ist die Entwicklung der Programme, die auf den oben genannten und in diesem Kapitel beschriebenen Verfahren basieren. Als erstes werden die numerischen Verfahren sowohl zur Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung als auch zur Monte-Carlo-Simulation vorgestellt. Anschließend wird beschrieben, wie die Zeitinterpretation der Langevin-Dynamik auf die Zeit, die in der Monte-Carlo-Simulation erhalten wird, abgebildet wird. Außerdenen wird die Fast-Fourier-Transformations-Methode zur Berechnung der langreichweitigen Dipol-Dipol-Wechselwirkung beschrieben. Abschließend wird ein numerisches Verfahren vorgestellt, das auf mikromagnetischen Betrachtungen beruht.

3.1 Numerische Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung

Das thermisch angeregte Ummagnetisierungsverhalten in klassischen Spinsystemen kann mit Hilfe der numerischen Integration der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung beschrieben werden. Lyberatos, Berkov und Chantrell [64] haben eine Methode zur numerischen Modellierung kleiner thermischer Fluktuationen in mikromagnetischen Systemen entwickelt, die auf der linearisierten Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung beruht. Alternativ zur Lösung der Fokker-Planck-Gleichung basiert dieser Langevin-Dynamik-Formalismus darauf, daß die Trajektorien im Phasenraum mittels der Bewegungsgleichung berechnet werden. Um den thermodynamischen Mittelwert der interessanten physikalischen Größen

ermitteln zu können, ist es notwendig, viele dieser Trajektorien mit gleicher Ausgangskonfiguration zu berechnen und anschließend über diese zu mitteln.

Bei der Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung mit Langevin-Dynamik handelt es sich um eine stochastische Differentialgleichung erster Ordnung mit multiplikativem Rauschen. Dieses Rauschen wird charakterisiert durch die Verteilung der Momente, die über eine Integration der Wahrscheinlichkeitsverteilung gewonnen werden, gemäß

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0 \quad \text{und} \tag{3.1}$$

$$\langle \zeta_i^{\nu}(t) \zeta_j^{\theta}(t') \rangle = D \delta_{i,j} \delta_{\nu,\theta} \delta(t - t'), \tag{3.2}$$

wobei i, j Gitterplätze charakterisieren und ν, θ kartesische Koordinaten repräsentieren.

Die x-Komponente[1] der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit Langevin-Dynamik,

$$\frac{(1+\alpha^2)\mu_{\mathrm{s}}}{\gamma} \dot{S}_{i,x} = - \; (S_{i,y} H'_{i,z} - S_{i,z} H'_{i,y}) \tag{3.3}$$

$$- \alpha \Big(S_{i,x} (S_{i,x} H'_{i,x} + S_{i,y} H'_{i,y} + S_{i,z} H'_{i,z}) - H'_{i,x} \Big), \tag{3.4}$$

mit dem effektiven Feld $\mathbf{H}'_i(t) = \boldsymbol{\zeta}_i(t) - \mathbf{H}_i = \boldsymbol{\zeta}_i(t) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}}$ läßt sich umformen in

$$\frac{(1+\alpha^2)\mu_{\mathrm{s}}}{\gamma} \dot{S}_{i,x} = - \; (S_{i,y} H_{i,z} - S_{i,z} H_{i,y})$$

$$- \alpha \Big(S_{i,x} (S_{i,x} H_{i,x} + S_{i,y} H_{i,y} + S_{i,z} H_{i,z}) - H_{i,x} \Big) \tag{3.5}$$

$$- \; (S_{i,y} \zeta_{i,z} - S_{i,z} \zeta_{i,y})$$

$$- \alpha \Big(S_{i,x} (S_{i,x} \zeta_{i,x} + S_{i,y} \zeta_{i,y} + S_{i,z} \zeta_{i,z}) - \zeta_{i,x} \Big). \tag{3.6}$$

Hierbei ergibt sich ein vom Rauschen unabhängiger Teil (3.5) und einen vom Rauschen abhängiger Teil (3.6).

Zur Lösung dieser Art von Differentialgleichung existieren zwei unterschiedliche theoretische Ansätze, zum einen nach Itô- und zum anderen nach Stratonovich [65], die auf unterschiedlichen Intergraldefinitionen beruhen. Diese beiden Ansätze führen zu verschiedenen Ergebnissen. Die numerische Integration mittels des Euler-Verfahrens etwa konvergiert gegen die Itô-Lösung der stochastischen Differentialgleichung, während die Verwendung der Heun-Methode auf die Stratonovich-Lösung führt. Eine detaillierte Diskussion dieses Itô-Stratonovich-Dilemmas ist in [35] dargestellt. Da die von Brown aus der Fokker-Planck-Gleichung hergeleiteten Ausdrücke auf der Stratonovich-Integration basieren, wird in dieser Arbeit das Heun-Verfahren [35, 66, 67] zur numerischen Lösung der Bewegungsgleichung verwendet.

[1] Die anderen beiden Komponenten ergeben sich durch zyklische Vertauschung.

Um diese Beschreibung des Heun-Verfahrens so einfach wie möglich zu halten, wird eine eindimensionale Differentialgleichung,

$$\dot{S}(t) = f\Big(S(t), H(t), t\Big) + g\Big(S(t), t\Big) \cdot \zeta(t), \tag{3.7}$$

herangezogen.

Die Zeitvariable t wird in n Zeitintervalle Δt unterteilt, so daß gilt $t_n = n\Delta t$ und $S_n = S(t_n)$. Somit ergibt sich für die Heun-Methode

$$\begin{aligned} S_{n+1} = S_n \quad &+ \quad \frac{1}{2}\Big(f(S_n, H_n, t_n) + f(\bar{S}_{n+1}, \bar{H}_{n+1}, t_{n+1})\Big)\Delta t \\ &+ \quad \frac{1}{2}\Big(g(S_n, t_n) + g(\bar{S}_{n+1}, t_{n+1})\Big) \cdot \bar{\zeta}_n. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Bei dieser Methode handelt es sich um ein Prediktor-Korrektor-Verfahren, wobei der Prediktor mit Hilfe der Euler-Methode gemäß

$$\bar{S}_{n+1} = S_n + f(S_n, H_n, t_n)\Delta t + g(S_n, t_n) \cdot \bar{\zeta}_n \tag{3.9}$$

bestimmt wird. $\bar{\zeta}_n$ sind Zufallszahlen mit einer Verteilung, die durch die ersten beiden Momente $\langle \bar{\zeta}_n \rangle = 0$ und $\langle \bar{\zeta}_n \bar{\zeta}_m \rangle = D\Delta t \delta_{n,m}$ charakterisiert werden.

Diese Art der Verteilung erhält man, indem Zufallszahlen mit einer Gaußschen Verteilung $p(\zeta) \sim \exp\left(-\zeta^2/2\sigma\right)$ mit einer Breite $\sigma = D\Delta t$ verwendet werden. Die gaußverteilten Zufallszahlen werden numerisch mit einem Algorithmus berechnet, der in [68] vorgestellt wird. Es werden zwei gleichverteilte Zufallszahlen $z_i, z_{i+1} \in [0:1]$ gezogen, wobei sich die gaußverteilte Zufallszahl ergibt aus $x_{2\mathrm{i}} = \sigma\sqrt{-2\ln(1-z_i)}\cos(2\pi\sigma\mu z_{i+1})$.

Die Verallgemeinerung der hier betrachteten Heun-Methode auf mehrdimensionale Probleme wird in [35, 69] vorgestellt. Der Einzelschrittfehler sowohl des Euler- als auch des Heun-Verfahrens konvergiert mit $\Delta t^{3/2}$ [66, 67, 69], wobei es keinen Unterschied macht, ob stochastische Differentialgleichungen mit additivem oder multipikativem Rauschen untersucht werden. Der Unterschied beider Verfahren besteht darin, daß die Euler-Methode gegen die Itô- und das Heun-Verfahren gegen die Stratonovich-Lösung konvergiert. Damit die Heun-Methode stabil ist, muß der Zeitschritt Δt so gewählt werden, daß er sehr viel kleiner ist als die Präzessionszeit τ_{Prae}. Praktisch wird in den Simulationen Δt so gewählt, daß es ein Prozent der Präzessionszeit beträgt.

Für die Simulationen werden die Ableitungen des effektiven Feldes $\mathbf{H}_i$, welches in der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung enthalten ist, zunächst analytisch berechnet. Da das Feld $\mathbf{H}_i$ selbst von allen Gitterplätzen abhängt, wird für die Berechnung die Fast-Fourier-Transformations-Methode verwendet, die im nächsten Kapitel beschrieben wird.

3.2 Fast-Fourier-Transformations-Methode

Um die Dipol-Dipol-Wechselwirkung effizient berechnen zu können, wird in dieser Arbeit die Fast-Fourier-Transformations-Methode (FFT-Methode) [70] für die Berechnung der langreichweitigen Wechselwirkungen verwendet [71, 72]. Diese Methode ist im Bereich des Mikromagnetismus etabliert, da sie effektiv ist und in diesem Rahmen ohne weitere Näherungen auskommt [4]. Bei dieser Methode wird das diskrete Faltungstheorem für die Berechnung der Dipolfelder

$$\mathbf{H}_i = \sum_{j \neq i} \frac{3\mathbf{e}_{i,j}(\mathbf{e}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_j}{r_{i,j}^3} \tag{3.10}$$

verwendet. Diese Dipolfelder können in der Form

$$H_i^\eta = \sum_{\theta,j} W_{i,j}^{\eta,\theta} S_j^\theta \tag{3.11}$$

geschrieben werden, wobei die griechischen Symbole η, θ für die kartesischen Komponenten x, y, z und die lateinischen Symbole i, j für die Gitterplätze stehen. $(W^{\eta,\theta})_{i,j}$ sind Wechselwirkungsmatritzen, die nur vom Gittertyp abhängen. Da das Gitter translationsinvariant ist, kann mit Hilfe des diskreten Faltungssatzes die Fourier-Transformierte des Dipolfeldes zu

$$H_\mathrm{k}^\eta = \sum_{\theta} W_\mathrm{k}^{\eta,\theta} S_\mathrm{k}^\theta \tag{3.12}$$

berechnet werden. So werden zunächst die Wechselwirkungsmatritzen $(W^{\eta,\theta})_{i,j}$ und ihre Fourier-Transformierte $(W^{\eta,\theta})_\mathrm{k}$ berechnet. Diese Rechnung muß nur einmal durchgeführt werden, nämlich vor Beginn der Simulationen, da die Wechselwirkungsmatritzen nur von der Gitterstruktur abhängen, und diese natürlich während der Simulationen nicht verändert wird. Für jede gegebene Spinkonfiguration kann dann das zugehörige Dipolfeld berechnet werden, indem zuerst die Fourier-Transformierte des Spins $\mathbf{S}_i$ bestimmt wird. Anschließend wird das Produkt, welches aus Gleichung 3.12 folgt, berechnet, und zum Schluß werden die Felder $\mathbf{H}_\mathrm{k}$ zurück in den Ortsraum transformiert, so daß die Dipolfelder $\mathbf{H}_i$ erhalten werden.

Um den Faltungssatz anwenden zu können, muß das System periodisch sein, und der Bereich der Wechselwirkung muß identisch mit der Systemgröße sein. In einem realistischen System sind diese beiden Annahmen im Normalfall nicht zur gleichen Zeit erfüllt: Einerseits könnten endliche Systeme betrachtet werden, in denen die Wechselwirkung ebenfalls endlich ist. Allerdings ist dann die Bedingung, daß das System periodischen sein muß, nicht erfüllt. Andererseits könnten endliche Systeme mit periodischen Randbedingungen simuliert werden. Hierbei ist das System endlich, allerdings ist die Dipol-Dipol-Wechselwirkung unendlich,

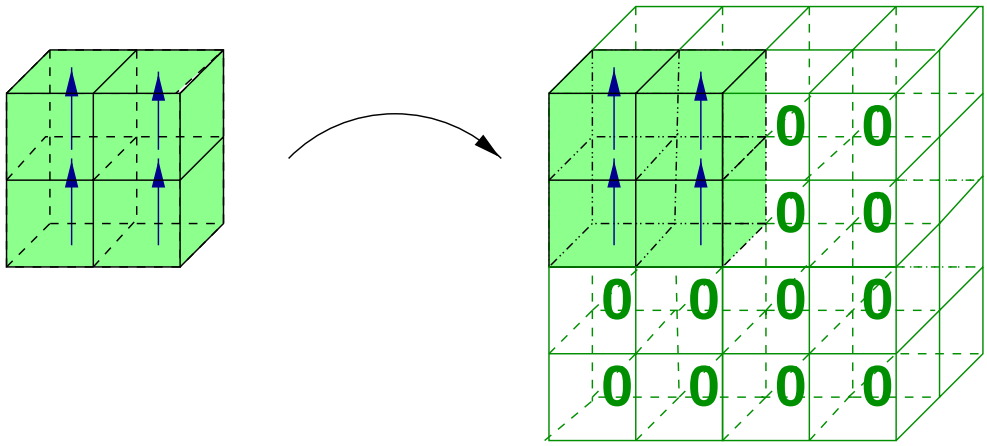


Abbildung 3.1: Darstellung zur Erklärung der *zero padding*-Methode. Das zu untersuchende System (grün eingefärbt) wird in alle drei Raumrichtungen verdoppelt und mit Nullen aufgefüllt.

so daß wiederum beide Voraussetzungen für die Anwendung des Faltungssatzes nicht gleichzeitig erfüllt sind.

In dieser Arbeit werden die Simulationen auf Untersuchungen von endlichen Systemen mit offenen Randbedingungen beschränkt, da dies eine realistische Beschreibung von Nanopartikeln ist. In diesem Fall kann die sogenannte *zero padding*-Methode [70] angewendet werden, die beide Voraussetzungen für die Anwendung des Faltungssatzes erfüllt. Diese Methode basiert auf der Verdopplung der Systemgröße in alle Raumrichtungen, wobei die Umgebung des Orginalsystems mit Nullen aufgefüllt wird. Dies ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Auf diese Weise wird ein System konstruiert, welches periodisch auf der Längenskala $2L$ ist, allerdings ist die Dipol-Dipol-Wechselwirkung endlich, so daß beide Bedingungen erfüllt sind[2].

Zur Berechnung der Fast-Fourier-Transformation stehen mathematische Bibliotheken zur Verfügung. In dieser Arbeit werden zum einen die Bibliotheken von IMSL und zum anderen die von FFTW[3] verwendet. Bei der FFTW-Bibliothek handelt es sich um ein *public domain* Programm, welches am Massachusettes Institute of Technology (MIT) von Matteo Frigo und Steven G. Johnson entwickelt wurde. Weitere Informationen zu dieser Bibliothek finden sich unter [73].

[2]Da die Dipol-Dipol-Wechselwirkung auf einer Distanz L abgeschnitten wird und außerdem für ein periodisches System berechnet wird, erlaubt diese Methode allerdings nicht, die Streufelder des Systems im Außenraum zu berechnen. Für eine Streufeldberechnung im Außenraum kann also die Fast-Fouriere-Transformations-Methode nicht verwendet werden, so daß in diesem Fall die Dipolfelder durch direkte Aufsummationen gewonnen werden müssen.

[3]FFTW steht für Fastest Fourier Transform in the West.

Die Grenze einer Simulation wird durch die simulierbare Systemgröße gegeben. Unter Verwendung einer Fast-Fourier-Transformations-Technik werden in dem Algorithmus nur $N \log N$ Rechnungen benötigt [70], während bei der direkten Berechnung der Dipolfelder durch direkte Aufsummation der Summe in $\mathcal{H}_w$ N^2 Rechenschritte benötigt werden. Die Systemgrößen, die simuliert werden können, werden durch den Speicherplatzbedarf begrenzt. Abhängig von der verwendeten Bibliothek treten neben den Datenfeldern für die Spinkomponenten und die Dipolfelder noch weitere Hilfsfelder auf, die zum Zwischenspeichern von erzeugten Daten verwendet werden. Beispielsweise werden bei der Verwendung von FFTW für ein System der Größe $6 \times 64 \times 512$ insgesamt 614MB Speicher benötigt. Ist das Ausgangsfeld, welches fouriertransformiert werden soll, reell, so bietet die FFTW-Bibliothek eine Funktion (*Real Multi-dimensional Transforms*) an, bei deren Anwendung ein Faktor zwei in der Zeit und im Speicherbedarf gespart werden kann. Für das Beispielsystem bedeutet dies, daß nur noch ungefähr 307MB Speicher benötigt werden. Diese Funktion wird in dieser Arbeit hauptsächlich verwendet.

3.3 Monte-Carlo-Simulationen

Eine Monte-Carlo-Simulation [60, 74, 75] berechnet näherungsweise eine Trajektorie im Phasenraum basierend auf der Master-Gleichung [59]

$$\frac{dP_s(t)}{dt} = \sum_{s'} \Big(P'_s(t) W_{s' \to s} - P_s(t) W_{s \to s'} \Big), \tag{3.13}$$

die die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_\mathrm{s}(t)$ im Phasenraum beschreibt.

Hierbei sind s und s' zwei verschiedene Zustände, die in der Abbildung 3.2 skizziert sind, in denen sich das System befinden kann. $P_s(t)$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich das System zur Zeit t in einem Zustand s befindet, und W ist die Übergangsrate, mit der das System aus einem Zustand in einen anderen übergeht. Die Übergangsraten gehorchen der Relation

$$\frac{W_{s \to s'}}{W_{s' \to s}} = \exp \frac{E(s) - E(s')}{k_\mathrm{B} T}, \tag{3.14}$$

wobei die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht (*detailed balance*) $P_s(t) W_{s \to s'} = P_{s'}(t) W_{s' \to s}$ erfüllt ist [59].

Die *heat-bath*-Wahrscheinlichkeit,

$$W_{s \to s'} = \frac{w_0}{1 + \exp \frac{E(s') - E(s)}{k_\mathrm{B} T}} \tag{3.15}$$

ist eine Möglichkeit, die Master-Gleichung 3.13 für jede Konstante w_0 zu erfüllen. Eine weitere Möglichkeit diese Gleichung zu erfüllen, ist die Verwendung der

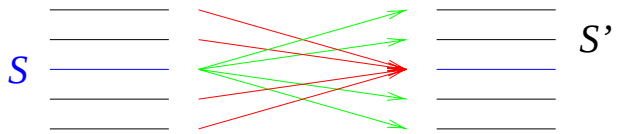


Abbildung 3.2: Dargestellt sind die Zustände eines Systems. Die grünen Pfeile beschreiben die möglichen Übergänge, bei denen das System aus dem Zustand s in andere Zustände übergeht, und die roten Pfeile repräsentieren die Übergänge, bei denen das System aus den anderen Zuständen in den Zustand s übergeht.

Metropoliswahrscheinlichkeit, die in dieser Arbeit allerdings nicht verwendet wird.

Die Master-Gleichung 3.13 beschreibt die Kopplung des Systems an ein Wärmebad [59]. Sie beschreibt nur die irreversiblen Anteile der Dynamik des Systems, die Relaxation und die Fluktuation. Der Präzessionsanteil wird im Gegensatz zur Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung nicht berücksichtigt, so daß die Präzession eines Spins im äußeren Magnetfeld mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode nicht gefunden werden kann. Auf der anderen Seite wird aber eine zufällige Bewegung aufgrund der Wechselwirkung mit dem Wärmebad erhalten, so daß dynamische Prozesse simuliert werden können. Diese Dynamik kann mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation untersucht werden, die ein qualitativ realistisches dynamisches Verhalten widerspiegelt, beruhend auf einer *single spin flip*-Dynamik.

Die Art und Weise wie eine Monte-Carlo-Simulation eines klassischen Heisenberg-Modells mit einer kontinuierlichen Anzahl von Freiheitsgraden abläuft, wird nun vorgestellt. Der *single spin flip*-Algorithmus setzt sich aus drei Schritten zusammen. Der Ablauf ist in Abbildung 3.3 skizziert.

1. Zuerst wird ein Spin $\mathbf{S}$ zufällig ausgewählt. Dies ist in den beiden linken Skizzen der Abbildung dargestellt.

2. Die Richtung dieses Spins $\mathbf{S}$ wird nun probeweise variiert (mittlere Skizze der Abbildung), d. h. mit diesem Spin wird ein sogenannter Versuchsschritt durchgeführt[4]. Auf diese Weise wird der Versuchsspin $\mathbf{S}'$ erhalten.

3. Nach der Wahl des Versuchsspins $\mathbf{S}'$ wird nun die Energiedifferenz, $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{S}) - \mathcal{H}(\mathbf{S}')$, zwischen dem ursprünglichen System und dem System, welches den Versuchsschritt $\mathbf{S}'$ enthält, mit Hilfe von Gleichung 2.5 bestimmt. Aufgrund dieser Energiedifferenz $\Delta\mathcal{H}$ wird der Versuchsschritt mit der *heat-bath*-Wahrscheinlichkeit akzeptiert. Wird dieser Schritt nicht

[4]Die verschiedenen Arten von Versuchsschritten werden später vorgestellt

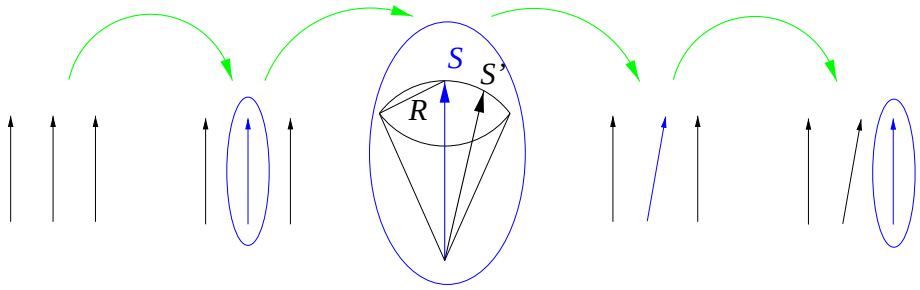


Abbildung 3.3: Dargestellt ist der Ablauf des *single spin flip*-Algorithmus. In den beiden linken Skizzen ist die Auswahl eines Spins **S** aus der Spinkonfiguration dargestellt, mit welchem ein Versuchsschritt durchgeführt wird. Die mittlere Skizze stellt die Durchführung eines Versuchsschritts dar, um den Versuchspin $\mathbf{S}'$ zu erhalten. Die beiden rechten Skizzen stellen die Akzeptanz des Versuchsschritts sowie die Auswahl eines erneuten Versuchsspins dar.

akzeptiert, so verharrt der Spin **S** in seiner ursprüngliche Position, andernfalls nimmt er die Position des Versuchsspins $\mathbf{S}'$ ein (rechte Skizzen der Abbildung). Nachdem dieser Schritt akzeptiert wurde oder auch nicht, wird die Prozedur wiederholt; es wird also ein neuer Versuchsspin ausgewählt.

Führt man den oben beschriebenen Algorithmus im Mittel einmal für jeden Spin auf dem betrachteten Gitter durch, so wird ein Monte-Carlo-Schritt (MCS) erhalten, der die quasi Zeitskala der Simulation beschreibt. Die Verbindung zu einer realistischen Zeitskala ist ein offenes physikalisches Problem, daß nur für einige spezielle Fälle gelöst ist [14, 29]. Im Kapitel 3.4 wird beschrieben wie die Zeitskala der Monte-Carlo-Simulation auf die der Langevin-Dynamik-Simulation mit Hilfe eines sogenannten quantifizierten Zeitschritts [14, 29, 31] abgebildet wird.

Die verschiedene Arten von Versuchschritten werden nun vorgestellt, die für den *single spin flip*-Algorithmus verwendet werden können. Zunächst werden drei mögliche Versuchsschritte für klassische Spinmodelle vorgestellt, die auch miteinander kombiniert werden können [76]. Bei der Wahl des Versuchschritts ist zu beachten, daß zwei Bedingungen erfüllt sein müssen: Dies ist zum einen die Ergodizität und zum anderen die Symmetriebedingung für Versuchsschritte, die zur Erfüllung der Master-Gleichung benötigt wird.

1. Eine Möglichkeit, die neue Spinrichtung des Versuchsspins zu erhalten, ist eine Spiegelung des Spins an einer Ebene des Systems (siehe Abbildung 3.4 links). Mit dieser Art von Schritt wird nicht der gesamte Phasenraum des Systems erreicht, so daß dieser Reflexionsschritt nicht ergodisch ist und nur

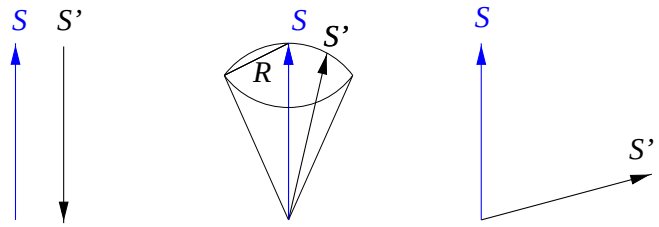


Abbildung 3.4: Darstellung der unterschiedlichen Arten von Versuchsschritten. Im linken Bild ist der Reflexionsschritt, im mittleren der kleine und im rechten Bild der gleichförmige Versuchsschritt skizziert.

in Kombination mit anderen (ergodischen) Versuchsschritten verwendet werden kann.

2. Eine weitere Möglichkeit, eine neue Spinrichtung zu erhalten, ist die, daß jede neue Versuchsspinstellung ausgewählt wird, unabhängig davon, wie der ursprüngliche Spin ausgerichtet war. Mit dieser Art von Schritt wird der gesamte Spinraum abgedeckt, er ist also ergodisch. Bei diesem gleichförmigen Schritt (siehe rechte Skizze der Abbildung 3.4) werden die neuen Koordinaten des Versuchsschritts generiert, indem ein zufälliger Vektor auf einer Einheitskugel mit einer konstanten Wahrscheinlichkeitsverteilung gewählt wird [77]. Der effizienteste Algorithmus, um Zufallsvektoren auf einer Einheitskugel zu bestimmen, stammt von Marsaglia [78].

3. Die dritte Möglichkeit, eine neue Spinrichtung des Versuchsspins zu erhalten, ist die in dieser Arbeit verwendete Methode:

   Zunächst wird ein zufälliger Vektor mit einer konstanten Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb einer Kugel mit dem Radius R mittels der Verwerfungsmethode (*rejection method*) konstruiert [77]. Dieser Vektor wird nun zu dem ursprünglichen Vektor hinzu addiert und anschließend wird der so gewonnene neue Versuchsspin normiert. Er befindet sich dann innerhalb eines Kegels um den ursprünglichen Spin dessen Öffnungswinkel von R bestimmt wird. Dies ist in der mittleren Skizze der Abbildung 3.4 dargestellt.

   Bei dieser Art den Versuchschritt durchzuführen ist jeder Spin nur in der Lage, eine kleine Bewegung auszuführen, was zu der Bezeichnung Kleiner-Schritt-Algorithmus führt.

Die Vor- und Nachteile dieser verschiedenen Algorithmen werden in [76] diskutiert. Der Kleine-Schritt-Algorithmus wird in der vorliegenden Arbeit verwendet, da dieser die Zeitinterpretation der Zeitskala der Monte-Carlo-Methode

im Sinne einer physikalischen Zeit basierend auf der Zeitskala der Langevin-Dynamik erlaubt. Im nächsten Kapitel wird nun die Zeitinterpretation unter Verwendung des quantifizierten Zeitschritts genauer diskutiert.

3.4 Zeitquantifizierung des Monte-Carlo-Verfahrens

Die Monte-Carlo-Methode mit quantifiziertem Zeitschritt basiert auf dem im vorangegangenen Kapitel beschriebenen *single spin flip*-Algorithmus, wobei der Kleine-Schritt-Algorithmus zur Ermittlung des Versuchsschritts verwendet wird. Dieser Versuchsschritt ist eine zufällige Bewegung des magnetischen Moments bis zu einem bestimmten maximalen Winkel. Die Versuchsschrittbreite R ist mit der Zeitskala Δt über eine Relation verknüpft, die im Verlauf dieses Kapitels genauer vorgestellt werden wird. Mit Hilfe dieser Beziehung wird erreicht, daß ein Monte-Carlo-Schritt pro Spin (MCS) dem Zeitintervall Δt der entsprechenden Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung im Fall hoher Dämpfung entspricht. Dies ist von großer Bedeutung, da die Monte-Carlo-Simulation normalerweise keine physikalische Zeit besitzt, und erst durch diese Abbildung Aussagen über die verwendeten Zeitskalen getroffen werden können. Diese Relation ermöglicht also die Wahl einer Versuchsschrittbreite in der Monte-Carlo-Simulation in der Weise, daß ein Monte-Carlo-Schritt einem mikroskopischen Zeitintervall zugeordnet wird.

Die grundlegenden Überlegungen, die zu dieser Relation führen, werden im folgenden beschrieben. Eine ausführliche Beschreibung der Herleitung und Diskussion der Relation findet sich in [14, 29]. Die grundlegende Idee hierbei ist der Vergleich der Fluktuationen, die in der Monte-Carlo-Methode innerhalb eines Monte-Carlo-Schritts auftreten, mit den Fluktuationen, die mit einer vorgegebenen Zeitskala der linearisierten stochastische Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung verbunden sind [30, 79].

Zunächst werden die Fluktuationen, die durch die Langevin-Gleichung verursacht werden, hergeleitet für einen einzelnen Spin mit uniaxialer Anisotropie d_z. Es wird angenommen, daß das angelegte Magnetfeld nur parallel oder antiparallel zur leichten Achse stehen kann, also gilt $\mathbf{B} = \pm B_z \hat{\mathbf{z}}$.

Mit Hilfe der linearisierten Form der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung ohne thermisches Rauschen können die Fluktuationen gemittelt über ein Zeitintervall Δt bestimmt werden zu

$$\langle \bar{S}_x^2 \rangle = \langle \bar{S}_y^2 \rangle = 2k_\mathrm{B}T \frac{\alpha\gamma}{(1+\alpha^2)\mu_\mathrm{s}} \Delta t. \tag{3.16}$$

Die Fluktuationen $\langle \bar{S}_x^2 \rangle$ innerhalb eines Monte-Carlo-Schritts für die Monte-Carlo-Simulation werden nun berechnet. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für

einen Versuchsschritt der Größe $r = \sqrt{s_x^2 + s_y^2}$ ist

$$p(r) = \frac{3\sqrt{R^2 - r^2}}{2\pi R^3}$$

für $0 \ll r \ll R$. In diesem Algorithmus wird ein Versuchsschritt mit *heat-bath*-Wahrscheinlichkeit $w(r)$ (siehe Gleichung 3.15) akzeptiert. Unter der Annahme, daß der Spin sich in der Nähe seiner Gleichgewichtsposition befindet, kann die Energie $\Delta E(r^2)$ für kleine r bestimmt werden. Die Fluktuation wird durch Integration über einen Teil des Phasenraums erhalten, der innerhalb eines Monte-Carlo-Schritts erreicht werden kann,

$$\begin{aligned} \langle \bar{S}_x^2 \rangle &= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^R r\mathrm{d}r \frac{w(r)}{2} p(r) \\ &= \frac{R^2}{10} - \mathcal{O}\Big(\frac{(2d_z + \mu_\mathrm{s} B_z) R^4}{k_\mathrm{B} T}\Big), \end{aligned} \tag{3.17}$$

wobei es sich um eine Entwicklung für kleine R handelt, die zu der Bedingung

$$R^2 \ll \frac{k_\mathrm{B} T}{2d_z + \mu_\mathrm{s} B_z}$$

führt. Der Vergleich der Fluktuationen innerhalb eines Zeitintervalls Δt für die Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung (3.16) und eines Monte-Carlo-Schritts (3.18) führt auf die Beziehung

$$R^2 = \frac{20 k_\mathrm{B} T \alpha \gamma}{(1 + \alpha^2)\mu_s} \Delta t \tag{3.18}$$

für einen Versuchsschritt der Breite R, mit deren Hilfe die Zeitskala der Monte-Carlo-Simulation auf die der Langevin-Dynamik zurück geführt werden kann.

Bei der Interpretation der Zeitskalen darf allerdings nicht vergessen werden, daß diese Methode auf einem Vergleich mit der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit Langevin-Dynamik beruht, in der die Ankopplung an das Wärmebad nur phänomenologisch über die Dämpfungskonstante α eingeführt wurde. Es fehlt also dementsprechend eine mikroskopische Begründung der Zeitskala, das heißt, daß es an einer absoluten mikroskopischen Zeit mangelt. Trotz dieser Einschränkungen konnte gezeigt werden, daß eine nicht triviale Beziehung zwischen der Monte-Carlo-Methode und der Langevin-Dynamik besteht. Eine weitere wichtige Aussage liefert die Temperaturabhängigkeit von R. Sie verdeutlicht ebenfalls, daß keine einfache Beziehung zwischen einem Monte-Carlo-Schritt und einem festen Zeitintervall besteht.

Bei der Wahl von R muß beachtet werden, daß auf der einen Seite R klein genug gewählt wird, so daß die Entwicklung und somit Gleichung 3.18 gilt. Auf der anderen Seite darf R aber nicht zu klein gewählt werden, da sonst

der Monte-Carlo-Algorithmus zu viel Rechenzeit benötigt. In der Praxis wird folglich entweder Δt so gewählt, daß R einen vernünftigen Wert besitzt, oder R vorgegeben, und die zugehörige Zeitskala Δt dazu bestimmt wird. Für die Simulationen in dieser Arbeit wurde die erste Möglichkeit gewählt, da sie sich als vernünftig in Bezug auf die Untersuchung von Temperaturabhängigkeiten erwies.

3.5 Fast-Fourier-Transformation im Monte-Carlo-Verfahren

In Kapitel 3.2 wurde die Fast-Fourier-Transformations-Methode vorgestellt. In diesem Kapitel wird die Implementation dieser Methode in den Monte-Carlo-Algorithmus diskutiert. Dieser Einbau ist problematisch, da während einer Monte-Carlo-Simulation die Spins nicht parallel aktualisiert werden. Die Dipolfelder müßten nach jedem *single spin flip* neu berechnet werden, da das Dipolfeld eines Spins von allen anderen magnetischen Momenten abhängt. Verändert sich also ein magnetisches Moment an irgend einem Ort des Gitters, ändert sich das gesamte Dipolfeld des Systems. In einem normalerweise verwendeten Monte-Carlo-Algorithmus werden die Dipolfelder in einem Feld gespeichert, welches nach jeder akzeptierten Änderung eines magnetischen Momentes aktualisiert wird [80]. In diesem Fall benötigt man N^2 Rechenoperationen pro Monte-Carlo-Schritt.

Um diesen Aufwand geringer zu halten, wird in dieser Arbeit das gesamte Dipolfeld erst dann mit Hilfe der Fast-Fourier-Transformations-Methode neu berechnet, nachdem mehrere MCS durchgeführt worden sind. Dies ist eine gute Näherung, solange die Änderungen der Spinkonfiguration in dem System innerhalb dieses Intervalls ausreichend klein sind. Um die Gültigkeit dieser Annahme systematisch zu zeigen, werden thermisch aktivierte Ummagnetisierungsprozesse in einer Spinkette[5] untersucht. Zunächst wird der „exakte“ Wert der reduzierten charakteristischen Zeit berechnet. In Kapitel 4.3 wird näher beschrieben, wie die charakteristische Zeit numerisch bestimmt wird. In diesem Fall wird das Dipolfeld in der Monte-Carlo-Simulation nach jeder akzeptierten Änderung des magnetischen Moments neu berechnet. Der auf diese Art gewonnene Wert ist in der Abbildung 3.5 als schwarze durchgezogene Linie dargestellt. Die Datenpunkte stellen die Abhängigkeit der reduzierten charakteristischen Zeit von der Länge des Intervalls Δt_u dar, in welchem die Dipolfelder neu berechnet werden. Zum Vergleich wurden die Simulationen für zwei verschiedene Versuchsschrittweiten R durchgeführt. Es ist zu sehen, daß für kleine Intervalle Δt_u die Werte für den „exakten“ Wert und die genäherten Werte übereinanderliegen.

Aus Abbildung 3.5 läßt sich entnehmen, daß dieses Verhalten auch für gewählte Intervalle Δt_u, die deutlich größer sind als ein MCS, der Fall ist.

[5] In Kapitel 5 wird die Spinkette ausführlich diskutiert.

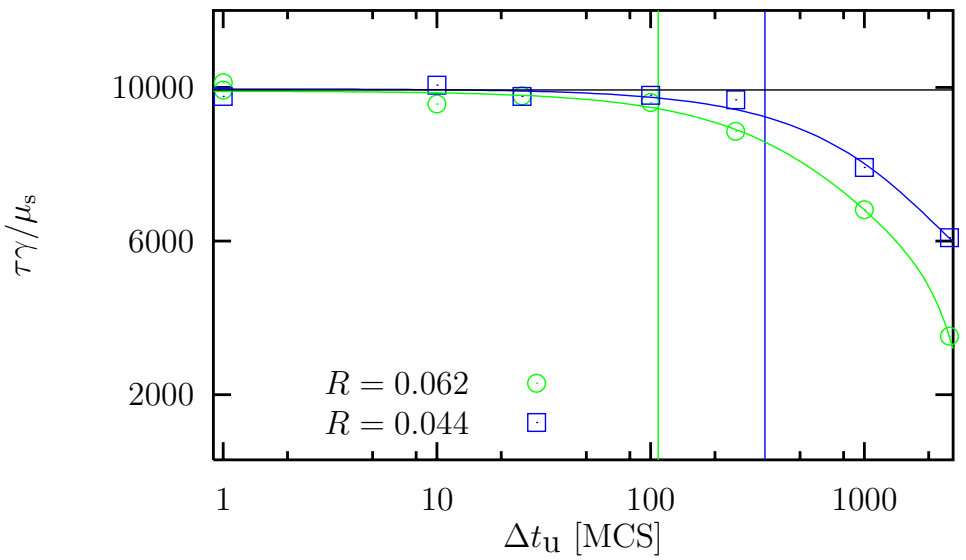


Abbildung 3.5: Reduzierte charakteristische Zeit $\tau\gamma/\mu_s$ über dem *update* Intervall Δt_u der Dipolfelder für verschiedene Versuchsschrittweiten R. Die durchgezogene schwarze Linie repräsentiert den „exakten“ Wert, wenn die Dipolfelder nach jedem Schritt, indem ein Spin neu gesetzt wird, berechnet werden. Die vertikalen Linien repräsentieren die Anzahl der MCS, die ein Spin mindestens benötigt, um umgedreht zu werden. Die Datenpunkte sind mit Hilfslinien verbunden. $L = 8$ Spins, $\alpha = 1$, $k_B T = 0.007J$, $\mu_s B_x = 0.15J$ und $w = 0.032J$.

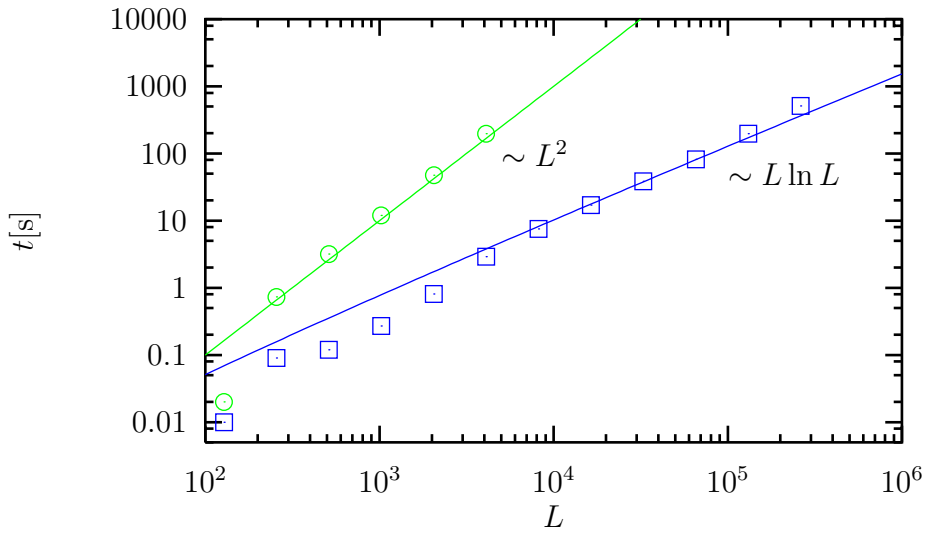


Abbildung 3.6: Rechenzeit t über der Systemgröße L der Spinkette. Die Daten stammen aus Monte-Carlo-Simulationen, bei denen die Dipolfelder, wie im Text erklärt, direkt (○) oder mit Hilfe der FFT-Methode (□) berechnet werden.

Dieser Datenkollaps hängt allerding von der Versuchsschrittweite R ab. Diese R-Abhängigkeit kann folgendermaßen verstanden werden: Die vertikalen Linien repräsentieren die minimale Anzahl von MCS, die ein Spin benötigt, damit er ummagnetisieren kann. Diese Größe kann aus der mittleren Schrittweite eines magnetischen Moments [29] unter der Annahme abgeschätzt werden, daß jeder Versuchsschritt aufgrund eines starken angelegten Magnetfeldes akzeptiert wird. Diese mittlere Schrittweite in einer Monte-Carlo-Prozedur ergibt sich zu $R/\sqrt{5}$. Hieraus resultiert dann die minimale Anzahl der MCS, um einen Spin umzudrehen, zu $\pi\sqrt{5}/R$. Aus diesen Überlegungen kann geschlossen werden, daß das gesamte Dipolfeld nach einem Intervall Δt_u, das kleiner ist als diese minimale Anzahl von MCS neu berechnet werden muß. Hieraus folgt allerdings ebenfalls, daß diese Methode nicht zur Simulation eines Ising-Modells verwendet werden kann.

Die Effizienz dieser beschriebenen Methode zur Berechnung der Dipolfelder in einer Monte-Carlo-Simulation soll nun näher untersucht werden. Dies geschieht anhand der Abbildung 3.6, in der die benötigte Rechenzeit für den Fall dargestellt ist, daß die Dipolfelder direkt durch Aufsummation nach jeder akzeptierten Änderung eines magnetischen Moments gewonnen werden und für den Fall, daß das Dipolfeld mit Hilfe der Fast-Fourier-Transformations-Methode nach jedem MCS neu berechnet wird. Hierbei ist die Rechenzeit die CPU-Zeit, welche auf einer IBM RS6000/590 Workstation für die Berechnung von 100 MCS benötigt wird. Wird die FFT-Methode verwendet, so ist die Rechenzeit proportional zu $L \ln L$, während die Rechenzeit für die direkte Berechnung mit L^2 skaliert. In dem Fall der Spinkette mit einer Länge von $2^{18} = 262144$ Spins ist die Fast-Fourier-Transformations-Methode um etwa einen Faktor 5000 effizienter als die direkte Methode. Sie ist am effizientesten für Systemgrößen, die sich aus Potenzen von Zwei zusammensetzen.

3.6 Mikromagnetische Simulationen

Die ersten numerischen Rechnungen zu mikromagnetischen Problemen stammen von LaBonte [81], Hubert [82] und Brown [83]. Die Methode der finiten Differenzen [84, 85] und die Methode der finiten Elemente [86, 87] sind die am häufigsten verwendeten numerischen Verfahren zur Untersuchung mikromagnetischer Problemstellungen wie zum Beispiel die Untersuchung magnetischer Strukturen und Magnetisierungsprozesse in nanostrukturierten Proben [38, 88–90].

Die folgende Beschreibung beschränkt sich auf die Methode der finiten Differenzen, da diese in dieser Arbeit herangezogen wird, um die Simulation eines Gitters von Dipolen (siehe Kapitel 2.1) mit mikromagnetischen Simulationen zu vergleichen. Dieser Vergleich wird in Kapitel 4.1 ausführlich diskutiert. Hierfür wird das häufig verwendete mikromagnetische Programm „Object Ori-

ented Micromagnetic Computing Framework“ (OOMMF) herangezogen, welches vom National Institute of Standards and Technology (NIST) entwickelt wurde [91]. Bei diesem Programm handelt es sich um einen mikromagnetischen Code, der kostenlos zur freien Verfügung gestellt wird. Mit der in dieser Arbeit verwendeten Programmversion (1.1b0) von OOMMF können nur zweidimensionale Problemstellungen ohne Berücksichtung thermischer Fluktuationen untersucht werden. Hierin beruhen die numerischen Rechnungen auf der numerischen Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung, wobei diese Gleichung mittels eines Predictor-Korrektor-Verfahrens zweiter Stufe nach Adams numerisch integriert wird.

Die Methode der finiten Differenzen beruht darauf, daß der Definitionsbereich der gesuchten Funktion durch ein regelmäßiges Gitter von Punkten ersetzt wird, an denen die gesuchte Funktion, hier die Magnetisierung $\mathbf{M}(\mathbf{x})$, sowie ihre Ableitung berechnet wird. Die Magnetisierung in der Diskretisierungszelle wird als konstante Funktion angenommen. Die Näherung der Lösungsfunktion ist umso besser, je dichter die Diskretisierungspunkte gesetzt werden. Im Grenzfall unendlicher Diskretisierung geht die genäherte Funktion in die gesuchte Funktion über. Da in dieser Methode regelmäßige Strukturen für die Diskretisierung benötigt werden, ist die Methode der finiten Differenzen nur eingeschränkt verwendbar.

Die magnetostatische Energie E_{MS} (siehe Gleichung 2.21) wird für den Fall der Methoden der finiten Differenzen ebenfalls mit Hilfe der Fast-Fourier-Transformations-Technik berechnet. Das Streufeld $\mathbf{H}_{\mathrm{s}}$ läßt sich an einem Punkt $\mathbf{r}$ analytisch über die Beziehung

$$\mathbf{H}_{\mathrm{s}}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}) \tag{3.19}$$

bestimmen [4]. Hierzu wird das Potential $\Phi(\mathbf{r})$,

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\mu_0}\Big[\int_V \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mathrm{d}V' + \oint_F \frac{\sigma(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mathrm{d}F'\Big], \tag{3.20}$$

benötigt.

$$\sigma(\mathbf{r}) = \mu_0\, \mathbf{n}\cdot\mathbf{M} \quad \text{und} \tag{3.21}$$

$$\rho(\mathbf{r}) = -\mu_0\, \nabla\cdot\mathbf{M} \tag{3.22}$$

sind die Oberflächen- und die Volumenladung des Streufeldes, wobei $\mathbf{n}$ ein Normalenvektor auf der Oberfläche der Probe ist. Um die Streufeldenergie gering zu halten, müssen sowohl die Oberflächen- als auch die Volumenladungen möglichst vermieden werden. Das Streufeld an einem Punkt $\mathbf{r}$ läßt sich gemäß

$$\mathbf{H}_{\mathrm{s}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\mu_0}\Big[\int_V \frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\mathrm{d}V' - \oint_F \frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\sigma(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\mathrm{d}F'\Big], \tag{3.23}$$

berechnen, wobei der erste Anteil eine Integration über das Volumen V und der zweite Anteil eine geschlossene Integration über die Oberfläche F des Ferromagneten ist. Dies hat zur Folge, daß der Wert der Streufeldenergie E_{MS} an einem Ort nicht von der Magnetisierungsverteilung in der Umgebung des Ortes abhängt, sondern sich aus Wechselwirkungen, die sich über die gesamte Probe erstrecken, bestimmen läßt.

Das Streufeld $\mathbf{H}_{\mathrm{s}}(\mathbf{r})$ sowie die magnetostatische Energie wird in den Simulationen folgendermaßen berechnet: Für die Methode der finiten Differenzen ist die Volumenladung des Streufeldes $\rho(\mathbf{r})$ in einem Diskretisierungsvolumen Null (siehe Gleichung 3.22), da die Magnetisierung konstant ist, so daß zur Berechnung des Streufeldes in Gleichung 3.23 nur die Integration über die Oberfläche betrachtet wird. Diese Beziehung wird nun in Gleichung 2.21 eingesetzt, so daß sich für die magnetostatische Energie eine Doppelintegration über die Oberfläche ergibt. Diese Integrale werden mit Hilfe der Fast-Fourier-Transformations-Methode berechnet.

Eine ausführliche Beschreibung und Diskussion der Methode der finiten Differenzen und der finiten Elemente, sowie eine detaillierte Beschreibung eines typischen Simulationsablaufes findet sich in [92]. Der heutige Schwerpunkt im Bereich der mikromagnetischen Rechnungen liegt in der Entwicklung numerischer Methoden zur Berücksichtigung thermischer Fluktuationen, um unter anderem thermisch aktivierte Ummagnetisierungsprozesse untersuchen zu können [34, 36, 37, 64, 93].

4 Test der Algorithmen

In diesem Kapitel werden einige Rechnungen vorgestellt, die dazu dienen, die in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellten Verfahren zu testen. Diese Tests sind erforderlich, da die numerischen Verfahren teilweise neu sind, und in der Literatur kaum etabliert. Für diese Art der Untersuchung werden einfache Systeme gewählt, die sich analytisch lösen lassen, damit diese analytischen Lösungen mit den erhaltenen numerischen Ergebnissen verglichen werden können.

Zu Beginn dieses Kapitels wird untersucht, ob die Beschreibung ferromagnetischer Materialien mit Hilfe von Dipolen äquivalent zur mikromagnetischen Beschreibung ist. Es wird gezeigt, daß beide Beschreibungen bei genügend kleiner Diskretisierung ähnliche numerische Ergebnisse liefern. Anschließend wird das Kurzzeitverhalten eines Partikels in einem äußeren Feld mit Hilfe der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit und ohne thermisches Rauschen numerisch untersucht. Im darauffolgenden Abschnitt wird das Langzeitverhalten dieses Systems diskutiert. Es kann gezeigt werden, daß das System mittels kohärenter Rotation thermisch aktiviert ummagnetisiert und die entsprechenden theoretischen Ergebnisse für die charakteristischen Zeiten numerisch bestätigt werden.

4.1 Vergleich mit OOMMF

Die Äquivalenz der Beschreibung ferromagnetischer Materialien mit Hilfe des klassischen Heisenberg-Modells (siehe Kapitel 2.1) zur mikromagnetischen Beschreibung (vgl. Kapitel 2.2) wird mit Hilfe von Simulationen des Ummagnetisierungsverhaltens eines kubischen Films numerisch untersucht. Der Film ist in Abbildung 4.1 skizziert. Er wird zum einen mit Hilfe des in Kapitel 3.6 beschriebenen mikromagnetischen Verfahrens untersucht. Für diese Simulationen wird das Programmpaket OOMMF verwendet. Da in der Version des Programmpakets OOMMF, die für die Untersuchungen in dieser Arbeit verwendet wurde, nur zweidimensionale Systeme untersucht werden können, wurde ein dünner Film für diese Untersuchungen ausgewählt. Zum anderen wird das gleiche System mit Hilfe des klassischen Heisenberg-Modells beschrieben und mit der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung ohne thermisches Rauschen numerisch untersucht. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird diese Methode als Dipol-Methode bezeichnet. Die mit diesen beiden Methoden numerisch erhaltenen Ergebnisse werden im folgenden miteinander verglichen.

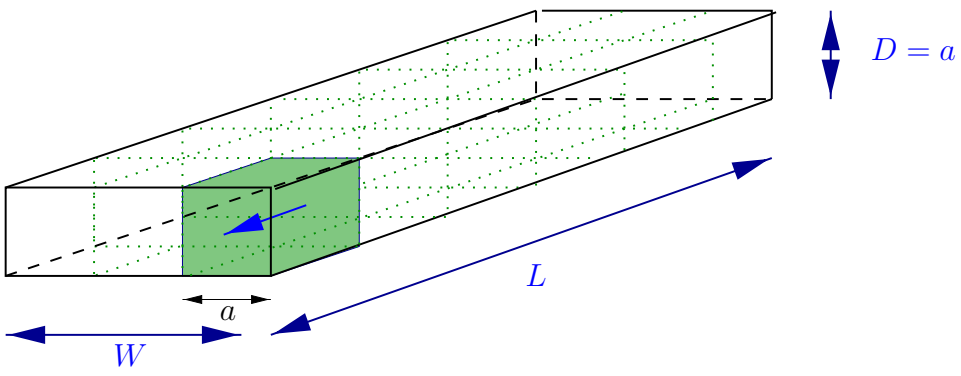


Abbildung 4.1: Skizze eines diskretisierten Films mit der Filmdicke D, Filmbreite W und Filmlänge L sowie der Gitterkonstanten a.

In den Simulationen wird die Gitterkonstante a variiert, wobei die Filmbreite $W = 80$nm und die Filmlänge $L = 640$nm konstant gehalten werden. Die Filmdicke D entspricht der Gitterkonstanten a, wird also entsprechend variiert. Es werden die Materialparameter von Fe verwendet, die in Tabelle 2.2 aufgeführt sind.

Zunächst wird der Fall eines Films mit einer Diskretisierung von $a = 20$nm untersucht. Im Vergleich zum Literaturwert der Domänenwandbreite, der 40nm beträgt [94], ist diese Diskretisierung sehr grob. In der Abbildung 4.2 sind die mit den beiden Simulationsmethoden gewonnenen Äste der Hysteresekurve aufgetragen. Der mit der Dipol-Methode simulierte Ummagnetisierungsprozeß setzt viel früher ein als der mit der mikromagnetischen Methode simulierte, dementsprechend weichen auch die Koerzitivfelder stark voneinander ab.

In Abbildung 4.4 sind die zugehörigen Momentaufnahmen für beide verwendeten Simulationsmethoden dargestellt. Die für diese Momentaufnahmen verwendete Farbkodierung kann mit Hilfe eines Farbkreises erläutert werden, der in Abbildung 4.3 dargestellt ist. Es hat sich gezeigt, daß eine zweidimensionale Farbkodierung zur Beschreibung der auftretenden Mechanismen in dünnen Filmen ausreicht, da die Magnetisierung stets in der Filmebene liegt, so daß diese in dieser Arbeit für alle Graphiken dieser Art verwendet wird.

Obwohl die Hysteresekurven verschieden sind, können die auftretenden Mechanismen dennoch miteinander verglichen werden, indem die Momentaufnahmen zu ungefähr gleichen Magnetisierungswerten dargestellt werden. Anhand der Momentaufnahmen ist zu sehen, daß beide Methoden ähnliche Ummagnetisierungsmechanismen liefern, die sich dennoch in einigen Punkten voneinander unterscheiden.

Zu Beginn der Simulationen sind alle magnetischen Momente entgegen der

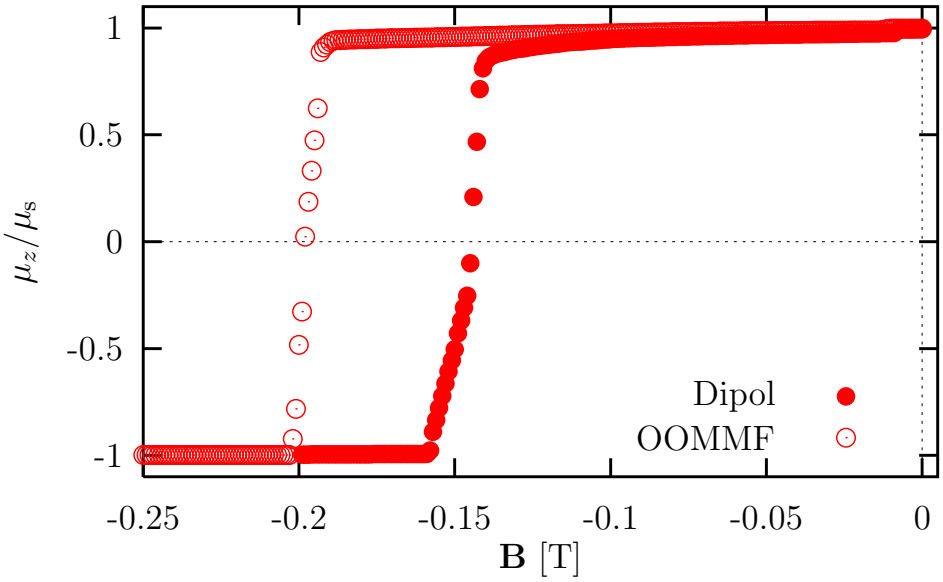


Abbildung 4.2: z-Komponente der Magnetisierung über dem Magnetfeld **B** für einen Film mit $a = 20$nm. Die Daten stammen aus numerischen Rechnungen, die auf der mikromagnetischen Beschreibung (OOMMF) und auf der mit Dipolen (Dipol) beruhen. $T = 0$ K, $\alpha = 1$

Richtung des angelegten Magnetfeldes ausgerichtet. Die erste Momentaufnahme (links) läßt erkennen, daß in beiden Fällen der Ummagnetisierungsmechanimus an den Enden einsetzt. Im mikromagnetischen Fall entsteht der sogenannte S-Zustand, der in Abbildung 6.6 skizziert ist und später in Kapitel 6.2 genauer erläutert werden wird, während in dem anderen Fall an den Enden Wirbelstrukturen entstehen. Wird das Magnetfeld weiter erniedrigt, so entstehen in beiden Fällen zwei Ising-artige Domänenwände, die durch das System laufen und sich schließlich miteinander verbinden (rechte Aufnahme), so daß noch Bereiche stehen bleiben, die in der ursprünglichen Richtung magnetisiert sind. Diese Bereiche werden letztlich bei weiterer Erniedrigung des Magnetfeldes herausgedrängt werden, bis der Film vollständig ummagnetisiert ist. Ein weiterer Unterschied zwischen den Dipol- und OOMMF-Simulationen besteht darin, daß während des gesamten Ummagnetisierungsvorgangs bei der Simulation mit OOMMF an den Enden noch Rückstände des remanenten S-Zustandes zu sehen sind, während die Enden in der Dipol-Simulation vollständig ummagnetisiert sind. Die in der Simulation auftretenden Ising-artigen Wände sind der Grund für die starke Abweichung der Simulationsergebnisse voneinander. Die Diskretisierung ist mit 20nm viel zu groß gewählt, so daß der auftretende Mechanismus nicht den realistisch auftretenden Mechanismus beschreibt.

Um eine realistischere Beschreibung der auftretenden Ummagnetisierungs-

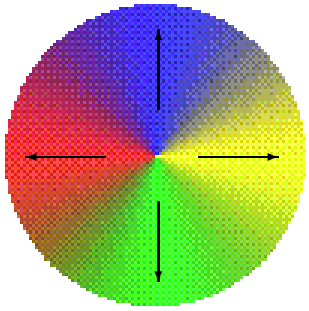


Abbildung 4.3: Darstellung der Farbkodierung der Komponenten der magnetischen Momente. Die Magnetisierung ist blau dargestellt, wenn die magnetischen Momente nach oben und grün, wenn sie nach unten orientiert sind. Gelb und rot sind die entsprechenden Darstellungen der senkrechten Komponenten in der Filmebene.

vorgänge zu erhalten, wird die Diskretisierung im folgenden verfeinert. In Abbildung 4.5 sind die numerischen Daten für einen Film mit einer Diskretisierung von 10nm und 5nm dargestellt. Für beide Diskretisierungen fallen die numerischen Daten, die mit den verschiedenen Simulationsmethoden berechnet wurden, bis auf kleine Abweichungen zusammen. Daß die Daten für beide verschiedenen Diskretisierungen nicht aufeinander liegen, liegt daran, daß mit Variation von a verschiedene Filmdicken simuliert werden, also physikalisch verschiedene Systeme. Die entsprechenden Momentaufnahmen für den Fall einer Diskretisierung von 5nm sind in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Momentaufnahmen wurden wie oben beschrieben ausgewählt, da die Daten nicht exakt aufeinander liegen.

Ein direkter Vergleich der Momentaufnahmen für 20nm (Abbildung 4.4) und 5nm (Abbildung 4.6), die aus den Simulationen mit Hilfe der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung stammen, zeigt, daß sich die numerischen Ergebnisse deutlich voneinander unterscheiden, wobei sich die Art des Ummagnetisierungsprozesses nicht ändert. Der Hauptunterschied ist, daß sich in dem feiner diskretisierten Film keine Ising-artigen Domänenwände mehr ausbilden.

Der Vergleich der Momentaufnahmen zeigt, daß sowohl die Dipol- als auch die OOMMF-Methode die gleichen numerischen Ergebnisse liefert. Hierbei setzt der Ummagnetisierungsmechanismus wiederum an den Enden ein, wobei diesmal in beiden Fällen ein S-Zustand entsteht. Die an den Enden entstanden Domänen unterscheiden sich für die beiden Methoden leicht voneinander: Die mit der Dipol-Methode gewonnen Resultate besitzen am oberen Ende an der rechten Seite und am unteren Ende an der linken Seite noch einen schmalen Bereich, indem noch die ursprüngliche Magnetisierungsrichtung vorherrscht, während im anderen Fall die Enden schon vollständig ummagnetisiert sind. Die drei folgenden Aufnahmen, bei weiterer Erniedrigung des Magnetfeldes, verdeutlichen, daß zwei Domänenwände entstehen, die durch das System aufeinander zu laufen, und so das System letztlich vollständig ummagnetisieren. Die Domänenwände sind in diesem Fall nicht Ising-artig, sondern besitzen eine Domänenwandbreite von ungefähr 30nm. Es konnte also gezeigt werden, daß im Fall kleiner Diskre-

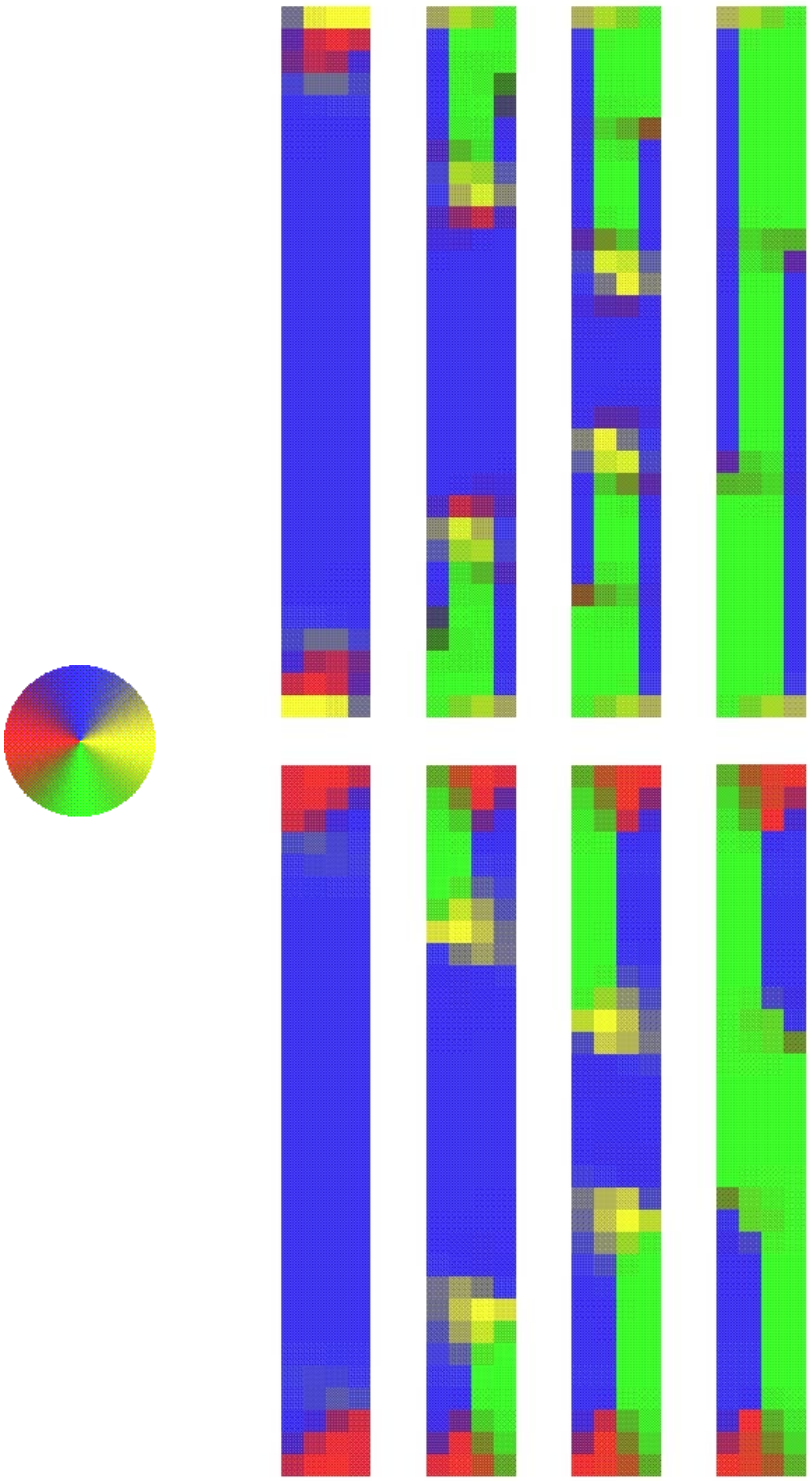


Abbildung 4.4: Momentaufnahme eines Films mit $a = 20$nm in einem sich ändernden äußeren Magnetfeld $\mathbf{B}$ (von links nach rechts: Dipol:-0.134T, -0.143T, -0.144T, -0.147T; OOMMF: -0.193T, -0.195T, -0.197T, -0.199T). Die Daten stammen aus numerischen Rechnungen, die auf der Dipol (oben) und auf der mikromagnetischen Beschreibung (unten) beruhen.

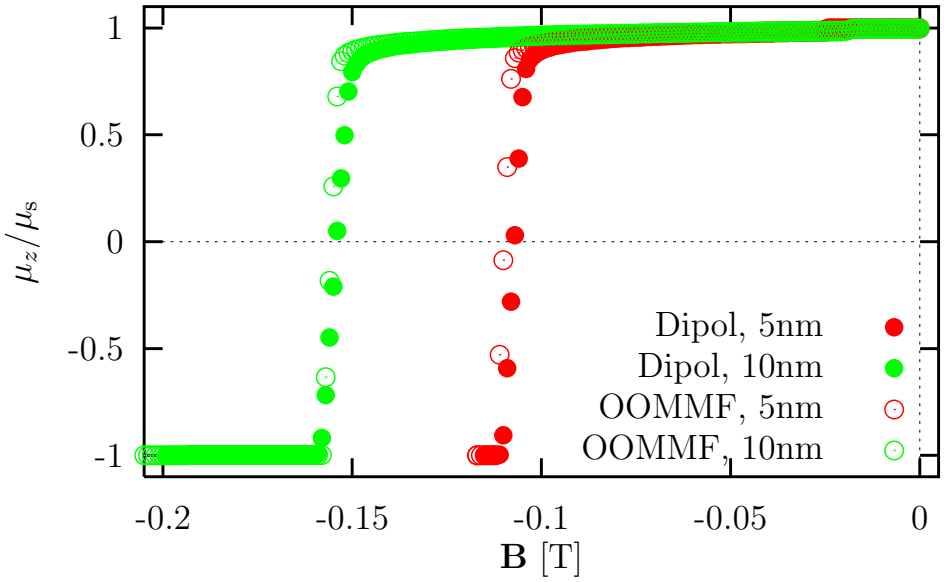


Abbildung 4.5: z-Komponente der Magnetisierung über dem Magnetfeld **B** für Filme mit verschiedenen Diskretisierungen. Die Daten stammen aus numerischen Rechnungen, die auf der Dipol (gefüllte Symbole) und der mikromagnetischen Beschreibung mit OOMMF (offene Symbole) beruhen. $T = 0$ K, $\alpha = 1$

tisierung die Beschreibung mit Hilfe eines klassischen Spinsystems die gleichen numerischen Ergebnisse liefert wie die mikromagnetische Beschreibung.

Im folgenden soll der Vergleich der Rechenzeit und des Speicherbedarfs der Verfahren vorgestellt werden, wobei diese beiden Größen allerdings nicht systematisch untersucht worden sind. Der Vergleich wird anhand der Simulationen der 10nm Diskretisierung vorgestellt, die auf einem Prozessor eines IBM RS6000 Modell: H70 durchgeführt wurden. Der Vergleich der Rechenzeiten zeigt, daß die Dipol-Methode (394s) nur ein Viertel der Rechenzeit benötigt, die bei OOMMF (1678s) anfällt. Dieser Unterschied liegt wohl darin begründet, daß unterschiedliche Verfahren verwendet werden, so daß der Zeitschritt nicht direkt aufeinander abgebildet werden kann. Bei OOMMF wird das Predictor-Korrektor-Verfahren zweiter Stufe nach Adams zur numerischen Integration verwendet, während bei der Dipol-Methode das Heun-Verfahren (siehe Kapitel 3.1) benutzt wird. Da die hier durchgeführten Simulationen ohne thermisches Rauschen sind, handelt es sich bei der Bewegungsgleichung um eine gewöhnliche Differentialgleichung, so daß das Heun-Verfahren mit $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ konvergiert [95]. Obwohl das Verfahren in dem hier betrachteten Fall nicht so schnell konvergiert wie das Verfahren nach Adams, wird es hier dennoch verwendet, da es im späteren Verlauf der Arbeit für die numerische Integration der temperaturabhängigen stochastischen Bewegungsgleichung benötigt wird. Der Speicher-

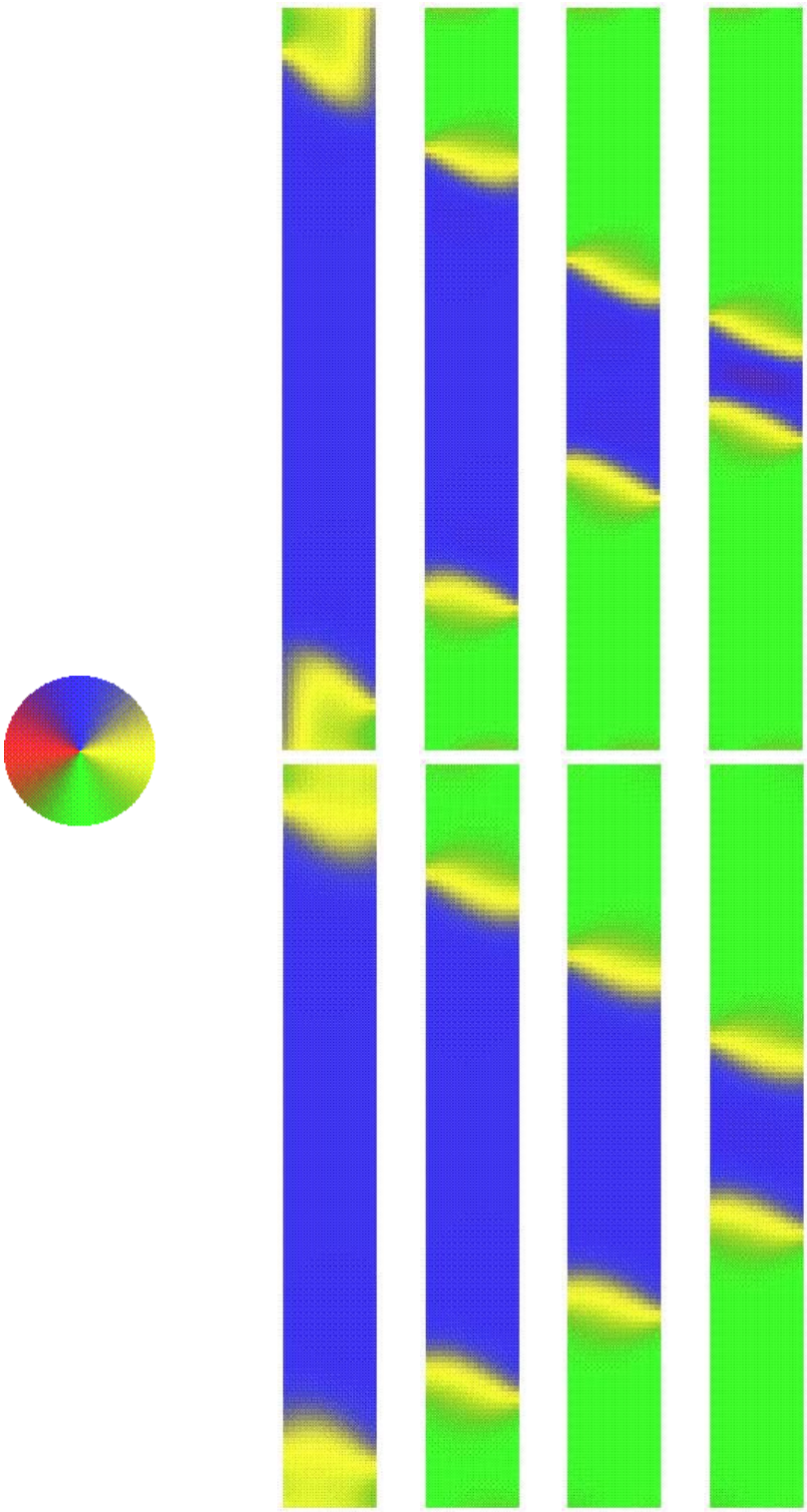


Abbildung 4.6: Momentaufnahme eines Films ($a = 5$nm) in einem sich ändernden äußeren Magnetfeld **B** (von links nach rechts: Dipol: -0.104T, -0.106T, -0.108T, -0.109T; OOMMF: -0.108T, -0.109T, -0.11T, -0.111T). Die Daten stammen aus Dipol-(oben) und OOMMF- (unten) Rechnungen.

bedarf von OOMMF (9MB) ist ebenfalls größer als der mit der Dipol-Methode (3MB). Dieser Unterschied ist wohl ein Hinweis darauf, daß unterschiedliche Fast-Fourier-Transformations-Bibliotheken zur Berechnung der Dipolfelder verwendet wurden.

4.2 Spinpräzession, Relaxation und Fluktuation

In diesem Kapitel wird das Verhalten eines Systems in einem zur leichten Achse schräg angelegten äußeren Magnetfeld numerisch untersucht. Hierbei wird zunächst die Präzessions- sowie die Relaxationsbewegung des magnetischen Moments ohne Berücksichtigung thermischer Fluktuationen diskutiert. Im nächsten Schritt wird der Einfluß der Temperatur auf das Verhalten des magnetischen Moments beschrieben. Da das Präzessionsverhalten im äußeren Feld von Interesse ist, wird die Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung 2.30 mit und ohne thermische Fluktuationen numerisch gelöst.

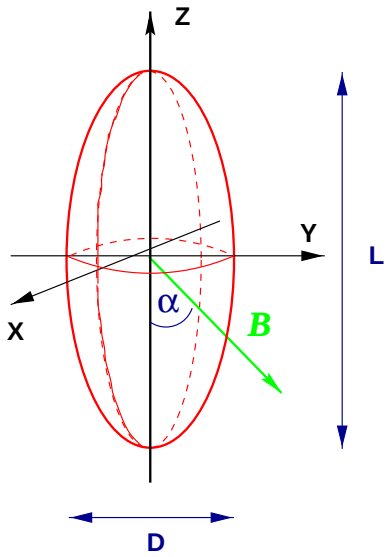


Abbildung 4.7: Dargestellt ist ein Rotationsellipsoid mit der Länge L und dem Durchmesser D. Das äußere Magnetfeld $\mathbf{B}$ wird unter einem Winkel α zur leichten Achse in der xz-Ebene angelegt.

Hierzu wird ein System untersucht, welches die Geometrie eines Rotationsellipsoiden mit einer Länge $L = 4$nm und einem Durchmesser $D = 2$nm besitzt. Die Gitterkonstante wird zu $a = 0.25$nm gewählt. Es wird eine uniaxiale Kristallanisotropie angenommen. Das System befindet sich in einem äußeren Magnetfeld $\mathbf{B} = (B_x, 0, B_z)$, das unter einem Winkel von 45° zur leichten z-Achse angelegt wird und einen Betrag von 1.13T besitzt. Die Transformationen auf die Materialparameter, die gewöhnlich in den Kontinuumsmodellen verwendet werden, sowie die entsprechenden Werte der Materialparameter für Co sind in Tabelle 2.2 aufgeführt. Das System ist in Abbildung 4.7 dargestellt.

In den folgenden numerischen Untersuchungen zeigt sich, daß sich das hier betrachtete System wie ein eindomäniges System verhält, das heißt, daß es

mittels kohärenter Rotation ummagnetisiert. Die magnetischen Momente sind während des Ummagnetisierungsprozesses nahezu parallel zueinander ausgerichtet, so daß das System als ein magnetisches Moment betrachtet werden kann. Das zugehörige Koerzitivfeld des betrachteten Systems läßt sich in diesem Fall mit Hilfe des Stoner-Wohlfarth-Modells (siehe Kapitel 2.4) berechnen. In dem hier betrachteten Fall von $\alpha = 45°$ wird das Koerzitivfeld gegeben durch $B_c = d_{\text{eff}} V/\mu_{\text{s}} \approx 0.7\text{T}$, wobei V das Volumen des Systems und d_{eff} eine effektive Anisotropiekonstante ist. Letztere setzt sich zusammen aus der Summe der uniaxialen Kristallanisotropie des Systems und einer Anisotropiekonstanten, die sich mit Hilfe der Entmagnetisierungsfaktoren $N_\perp$ und $N_\parallel$ eines Rotationsellipsoiden über die Beziehung $d = \mu_0 M_{\text{s}}^2 a^3 (N_\perp - N_\parallel)$ berechnen läßt [4, 54].

Der für die Simulationen gewählte Betrag des Magnetfelds ist größer als das Koerzitivfeld ($B > B_{\text{c}}$), so daß keine Energiebarriere ΔE_{cr} vorliegt. In diesem Fall kann das System auch ohne thermische Fluktuationen ummagnetisieren (siehe Kapitel 2.4). Hierbei treten sogenannte schnelle Ummagnetisierungsprozesse auf [39, 40].

Das Verhalten dieses Systems in einem äußeren Magnetfeld, wobei keine thermische Fluktuationen und nur eine sehr geringe Dämpfung ($\alpha = 0.01$) berücksichtigt werden, wird nun numerisch untersucht. In diesem Fall präzediert das magnetische Moment um sein inneres Feld $\mathbf{B}_i = \partial\mathcal{H}/\partial(\mu_{\text{s}}\mathbf{S})$. Dieses innere Feld wird durch das äußere Magnetfeld, das Dipolfeld, den Austausch sowie die Anisotropie verursacht. Die Präzessionszeit für ein einzelnes magnetisches Moment, welches sich in dem hier betrachteten Magnetfeld befände, wäre $\tau_{\text{Prae}} = 2\pi(1+\alpha^2)/(\gamma B) \approx 32\text{ps}$ (vgl. Kapitel 2.3). Die zugehörige Relaxationszeit ergibt sich zu $\tau_{\text{Rel}} = \tau_{\text{Prae}}/\alpha \approx 3200\text{ps}$ (ebenfalls in Kapitel 2.3). Da die Relaxationszeit im Vergleich zur Präzessionszeit sehr groß ist, spielt sie zu Beginn der Simulationen keine große Rolle, so daß hauptsächlich die Spinpräzession beobachtet werden kann, die im folgenden diskutiert wird.

In Abbildung 4.8 sind sowohl die Zeitabhängigkeit der x-, y- und z-Komponenten sowie der Betrag der Magnetisierung für dieses System aufgetragen. Anhand dieser Darstellung ist zu erkennen, daß alle drei Komponenten oszillieren, wobei die Präzessionszeit $\tau_{\text{Prae}} \approx 35\text{ps}$ beträgt. Die Abweichung liegt darin begründet, daß in der Simulation das System nicht nur -wie angenommen wurde- aus einem einzelnen magnetischen Moment besteht, sondern aus mehreren, die -wie schon erwähnt- ein inneres Feld $\mathbf{B}_i$ erzeugen. Dieses innere Feld wirkt sich auf die Präzessionsbewegung und somit auch auf die Präzessionszeit aus. Daß das System nicht nur präzediert, sondern auch relaxiert, kann ebenfalls der Abbildung 4.8 entnommen werden: Der maximale Magnetisierungswert der z-Komponente nimmt mit fortschreitender Zeit schwach ab.

In der Abbildung 4.9 ist der Versuch dargestellt, die Bahnkurve der Präzessionsbewegung des magnetischen Moments $\boldsymbol{\mu}$ darzustellen. Für diese Abbildung sind die ersten 30ps der Bewegung herausgegriffen worden, die in Abbildung

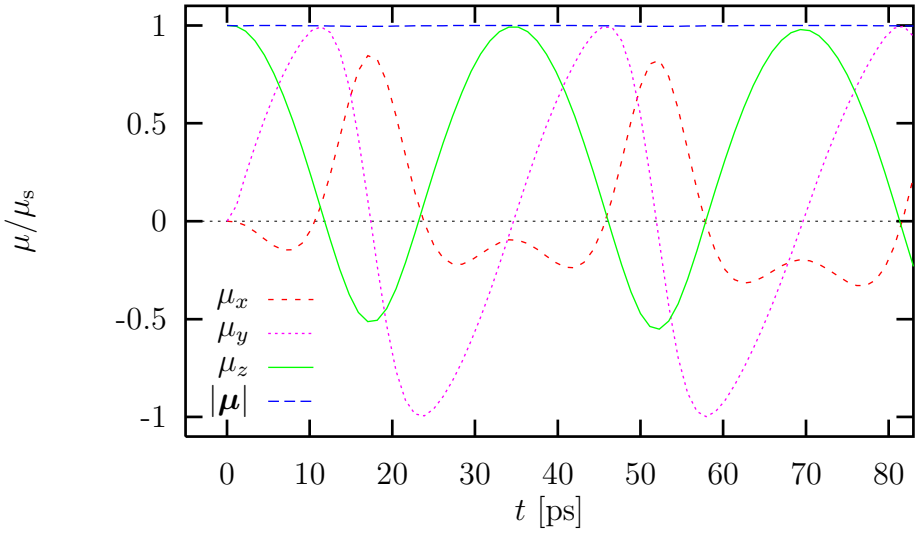


Abbildung 4.8: Komponenten und Betrag der Magnetisierung über der Zeit t.

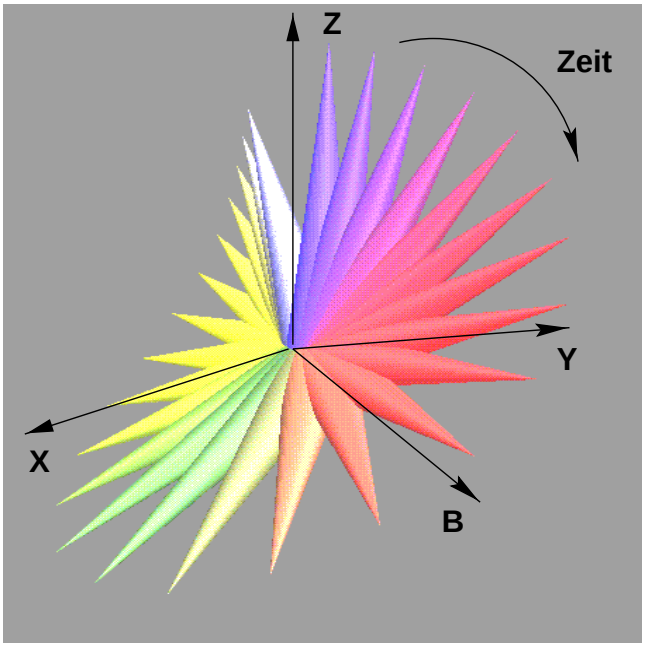


Abbildung 4.9: Darstellung der Präzessionsbewegung des simulierten Systems zu verschiedenen Zeiten t. Die zugehörige Magnetisierungskurve ist in Abbildung 4.8 dargestellt.

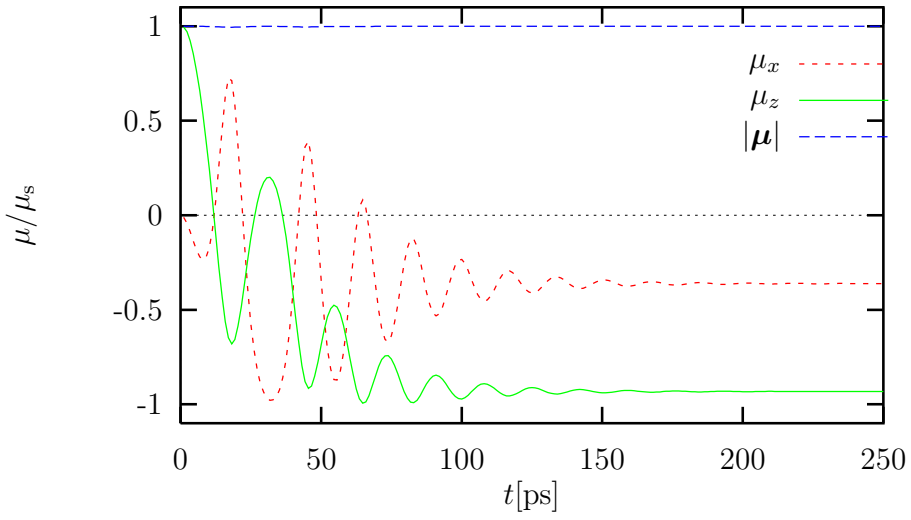


Abbildung 4.10: Komponenten und Betrag der Magnetisierung des gleichen Systems wie in Abbildung 4.8 über der Zeit, wobei die Dämpfung höher ist.

4.8 dargestellt ist. Die zweidimensionale Farbkodierung, die in Abbildung 4.3 beschrieben ist, wird hier auf drei Dimensionen übertragen. Die Farbkodierung der zy-Ebene entspricht der in Abbildung 4.3. Es ist zu erkennen, daß das magnetische Moment $\boldsymbol{\mu}$ um das innere Feld $\mathbf{B}_i$ präzediert und nicht um das äußere angelegte Magnetfeld $\mathbf{B}$, was zu einer erheblich komplizierten Bewegung führt.

Bisher wurde das Verhalten eines Systems im Fall geringer Dämpfung untersucht. Für die nun folgenden Simulationen wird der Wert der Dämpfungskonstante vergrößert ($\alpha = 0.1$). Die Präzessionszeit beträgt ebenfalls $\tau_{\text{Prae}} \approx 32$ps, allerdings verringert sich die Relaxationszeit beträchtlich. In Abbildung 4.10 sind die zugehörigen x- und z-Komponenten der Magnetisierung in Abhängigkeit der Zeit dargestellt. In dieser Abbildung ist sowohl die Präzessionsbewegung als auch die Relaxation ins Gleichgewicht zu erkennen. Die Oszillation der x- und z-Komponente beruht, wie schon im Fall niedriger Dämpfung diskutiert wurde, auf der Präzessionsbewegung des magnetischen Moments um das innere Feld. Die Amplitude verringert sich aufgrund der Relaxationsbewegung des magnetischen Moments. Da in diesem System keine thermischen Fluktuationen berücksichtigt werden, bleibt der Wert der Magnetisierung konstant, nachdem das System seinen stabilen Gleichgewichtswert erreicht hat.

In Abbildung 4.11 ist nochmals die Zeitabhängigkeit des magnetischen Moments für das bisher diskutierte System aufgetragen, allerdings werden hierbei thermische Fluktuationen berücksichtigt. Die Temperatur wurde zu 16K gewählt. Die Kurven unterscheiden sich von den vorher betrachteten Kurven

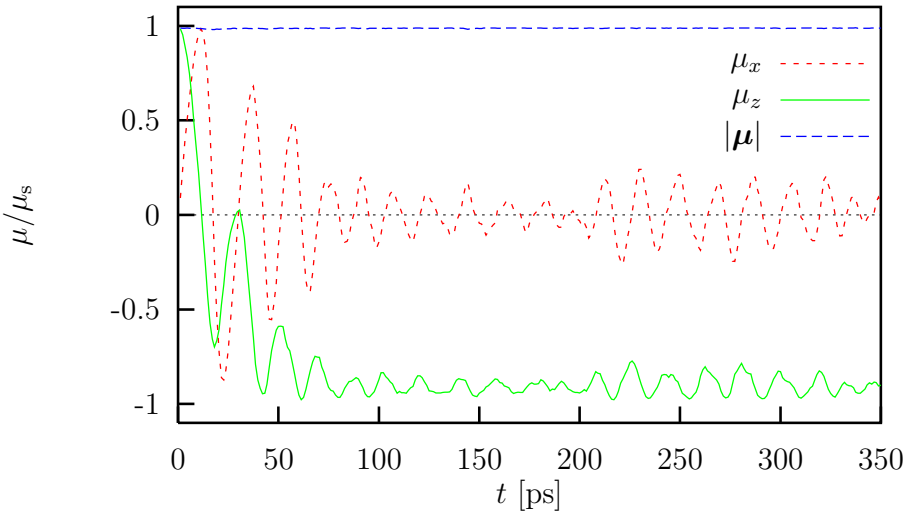


Abbildung 4.11: Komponenten und Betrag der Magnetisierung für das gleiche System wie in Abbildung 4.10, wobei diesmal thermische Fluktuationen berücksichtigt wurden.

in Abbildung 4.10 dadurch, daß die Komponenten des magnetischen Moments um den Gleichgewichtswert oszillieren, in den das System relaxiert ist. Diese Oszillationen werden durch die thermischen Fluktuationen verursacht. Sowohl die Präzessions- als auch die Relaxationszeiten ändern sich dadurch nur gering.

Bisher wurde das Verhalten eines Systems in einem äußeren Magnetfeld untersucht, welches größer als das Koerzitivfeld ist. Im anschließenden Kapitel soll nun der andere Grenzfall diskutiert werden: das äußere angelegte Magnetfeld ist kleiner als das Koerzitivfeld. In diesem Fall verschwindet die Energiebarriere ΔE_{cr} nicht, und das System kann nur mit Hilfe thermischer Fluktuationen ummagnetisieren. Wiederum unter der Annahme, daß es sich um ein eindomäniges System handelt, kann das Ummagnetisierungsverhalten dieses Systems analytisch mit Hilfe des Modells von Néel und Brown beschrieben werden.

4.3 Néel-Brown-Modell

Für die Untersuchung des thermisch aktivierten Ummagnetisierungsverhaltens wird ebenfalls das schon in Kapitel 4.2 untersuchte System verwendet. Für die folgenden Untersuchungen des Langzeitverhaltens [39, 40] beträgt die Gitterkonstante a 0.5nm. Die Gittergröße wurde geändert, um den Rechenzeitbedarf zu senken. In [29] wurde anhand der Untersuchung des Ummagnetisierungs-

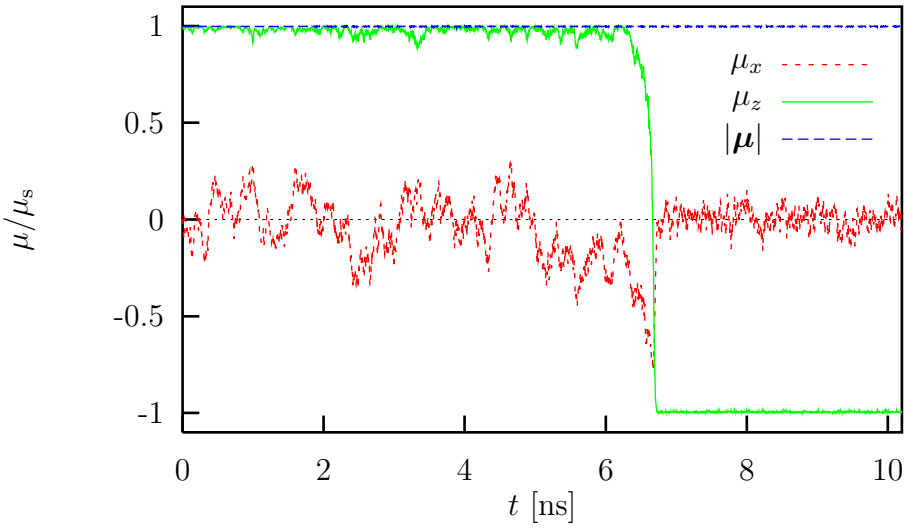


Abbildung 4.12: Darstellung der Zeitabhängigkeit der x- und z-Komponente sowie des Betrags der Magnetisierung. Das System ist das gleiche wie in Abbildung 4.11, diesmal mit hoher Dämpfung und anderer Gitterkonstante.

verhaltens eines einzelnen magnetischen Moments gezeigt, daß beide Verfahren, Monte-Carlo- sowie Langevin-Dynamik Simulationen, identische Ergebnisse liefern, so daß für die folgenden numerischen Untersuchungen die Monte-Carlo-Methode verwendet wird, ebenfalls um Rechenzeit zu sparen. In Kapitel 5.1 wird gezeigt, daß beide Verfahren im Fall hoher Dämpfung identisch sind, so daß für die Dämpfung $\alpha = 4$ gewählt wird. Das Feld $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ wird in Richtung der leichten Achse angelegt. Es ist antiparallel zur Orientierung der magnetischen Momente im Ausgangszustand ausgerichtet und besitzt eine Stärke von 1.1T. Für diesen Fall liefert das Stoner-Wohlfarth-Modell das Koerzitivfeld $B_c = 2d_{\text{eff}}V/\mu_s \approx 1.39$T.

In Abbildung 4.12 ist die Zeitabhängigkeit der x- und z-Komponente sowie der Betrag des reduzierten magnetischen Moments $\boldsymbol{\mu}/\mu_s$ für das hier betrachtete System dargestellt. Die Monte-Carlo-Simulationen wurden für eine Temperatur von 5K durchgeführt. Die z-Komponente der Magnetisierung bleibt zunächst konstant auf einer Zeitskala, die größer ist als die Zeitskalen in dem vorangegangenen Kapitel. Plötzlich bricht der Wert der Magnetisierung ein und ihr Vorzeichen wechselt. Der Zeitpunkt, an dem die z-Komponente der Magnetisierung Null ist, wird in den Simulationen mit der charakteristischen Zeit t_s identifiziert ($\mu_z(t_s) = 0$). Hier ist die zugehörige charakteristische Zeit ungefähr 6.6ns. Der Verlauf des Betrags des magnetischen Moments läßt darauf schließen, daß das System mittels kohärenter Rotation ummagnetisiert, da der Betrag der

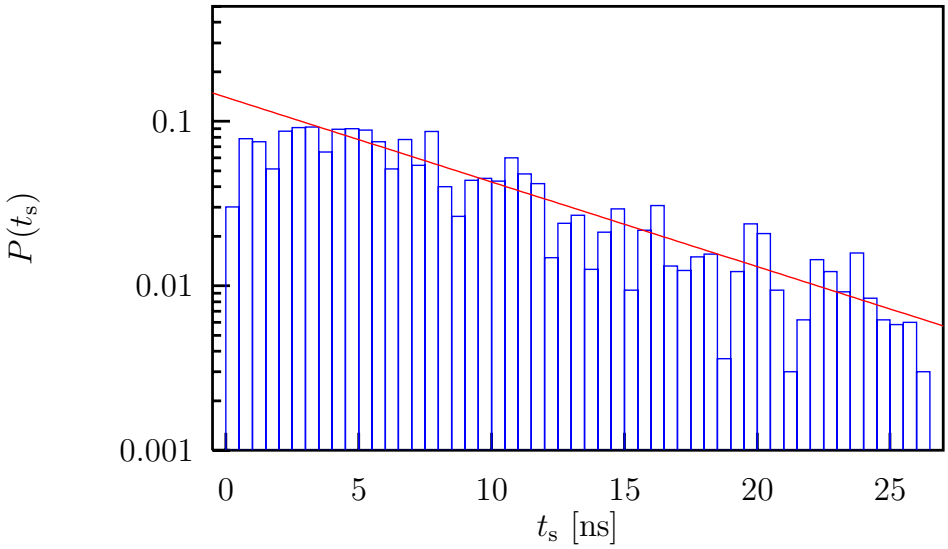


Abbildung 4.13: Verteilung der Ummagnetisierungszeiten t_s für das in Abbildung 4.12 betrachtete System. Die durchgezogene Linie verdeutlicht das exponentielle Verhalten mit τ =8.43ns.

Magnetisierung während des gesamten Ummagnetisierungsprozesses konstant bleibt [25].

Diese Art von Ummagnetisierungsprozeß ist ein statistischer Prozeß im Gegensatz zur Kurzzeitdynamik, wo die Ummagnetisierung aus dem deterministischen Teil der Bewegungsgleichung resultiert. Die mittlere charakteristische Zeit τ wird über N Systeme gemittelt, $\tau = 1/N \sum_s^N t_s$ [25]. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(t_s)$ dafür, daß eine Ummagnetisierung nach einer Zeit t_s stattfindet, gehorcht einem Exponentialgesetz [9] gemäß

$$P(t_s) \sim \exp\left(-\frac{t_s}{\tau}\right), \tag{4.1}$$

wobei τ die charakteristische Zeit ist. Dieses Gesetz gilt auf großen Zeitskalen. In Abbildung 4.13 ist die Verteilung der charakteristischen Zeiten τ_s für 10000 Monte-Carlo-Läufe dargestellt. Die Verteilung zeigt einen exponentiellen Verlauf und bestätigt somit Gleichung 4.1, wobei die gemittelte charakteristische Zeit 8.43ns beträgt. Die Abweichung vom exponentiellen Verlauf im Bereich kurzer Zeiten zeigt, daß das Exponentialgesetz nur für den Bereich großer Zeiten gültig ist.

Die mittlere Zeitskala in einem thermischen Ummagnetisierungsprozeß ist durch die charakteristische Zeit τ gegeben, die in Kapitel 2.4 ausführlich disku-

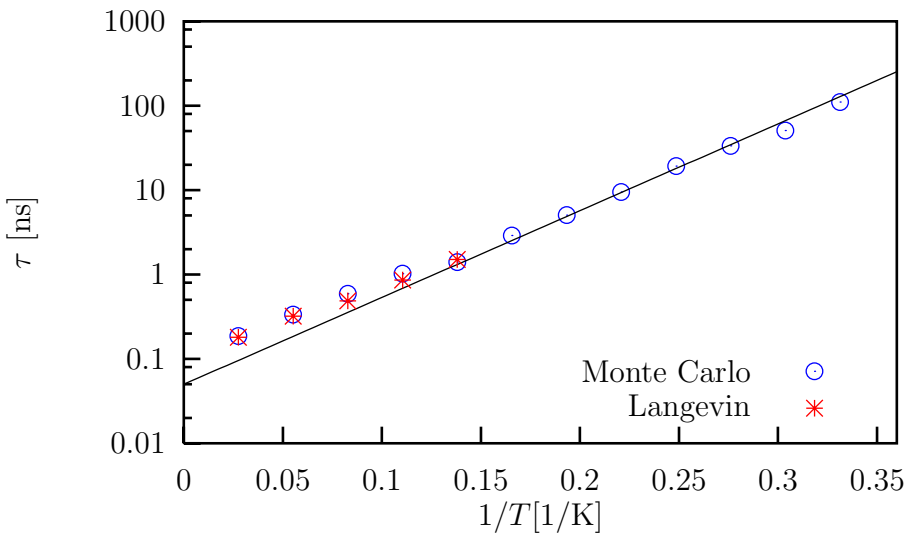


Abbildung 4.14: Charakteristische Zeit τ über $1/T$ für das in diesem Kapitel betrachtete System. Die Steigung der durchgezogenen Linie repräsentiert die Energiebarriere ΔE_{cr} (vgl. Gleichung 4.3). Die Daten stammen aus Monte-Carlo- und Langevin-Dynamik-Simulationen.

tiert wurde. Sie gehorcht dem Gesetz

$$\tau = \tau_0 \exp \frac{\Delta E}{k_{\mathrm{B}} T}, \tag{4.2}$$

wobei der Vorfaktor τ_0 sowie die zugehörige Energiebarriere ΔE von der auftretenden Ummagnetisierungmode abhängen. Für ein eindomäniges System ist sowohl der Vorfaktor als auch die Energiebarriere theoretisch bekannt. Der Vorfaktor τ_{cr} wurde von Brown bestimmt und ist durch Gleichung 2.39 gegeben. Die zugehörige Energiebarriere ΔE_{cr} wird gegeben durch

$$\Delta E_{\mathrm{cr}} = d_{\mathrm{eff}} V \Big(1 - \frac{B}{B_{\mathrm{c}}}\Big)^2. \tag{4.3}$$

In Abbildung 4.14 ist die Temperaturabhängigkeit der charakteristischen Zeiten aufgetragen. Jeder Datenpunkt wurde über 100 unabhängige Läufe gemittelt. Der mittlere Fehler des Mittelwertes ist in der Abbildung nicht eingezeichnet, da er in der Größenordnung der Symbolgröße liegt. Dies gilt übrigens auch für die späteren Kapitel. Die Daten stammen sowohl aus Monte-Carlo- als auch aus Langevin-Dynamik-Simulationen.

Die Abbildung zeigt, daß die Datenpunkte beider Methoden zusammenfallen. Dies steht in Einklang mit den Untersuchungen in [29] und bestätigt nochmals,

daß die Methode für diese Art Untersuchungen im Bereich hoher Dämpfung frei wählbar ist, so daß die Wahl in dieser Arbeit meist auf die schnellere Monte-Carlo-Methode fällt. In Kapitel 5.1 werden die Ergebnisse beider Methoden nochmals für ein komplizierteres System gegenübergestellt, wobei wiederum dasselbe Übereinstimmung zu erkennen ist.

Die charakteristische Zeit τ sowie die Energiebarriere ΔE_{cr} werden nun unter zu Hilfe nahme der Abbildung 4.14 diskutiert. Der Wert des Vorfaktors τ_{cr} entspricht nicht dem theoretischen Wert. Diese Abweichung läßt sich dadurch erklären, daß sich das hier simulierte System doch nicht — wie angenommen wurde — wie ein einzelnes magnetisches Moment verhält. Die magnetischen Momente des betrachteten Systems sind nur nahezu parallel zueinander ausgerichtet, so daß die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Spins doch einen Einfluß auf die erhaltene charakteristische Zeit ausübt. Dieser Einfluß wurde von Brown [9] in seiner Herleitung des Vorfaktors nicht berücksichtigt, so daß in der analytischen Formel 2.39 keine Systemgrößenabhängigkeit enthalten ist. Mit Hilfe der Simulationsdaten in Abbildung 4.14 und in Kapitel 5.1, wo die Abhängigkeit des Vorfaktors von der Systemgröße im Fall der kohärenten Rotation einer Spinkette näher untersucht wird, kann ebenfalls geschlossen werden, daß der Vorfaktor Systemgrößenabhängig ist und Wechselwirkungen berücksichtigt werden müssen.

Die Steigung der durchgezogenen Linie entspricht der Energiebarriere für einen Ummagnetisierungmechanismus mittels kohärenter Rotation, die durch die Gleichung 4.3 gegeben ist und sich zu $\Delta E_{\mathrm{cr}} = 3.27 \cdot 10^{-22}\mathrm{J}$ ($B_c = 1.39\mathrm{T}$) ergibt. Im Bereich tiefer Temperaturen, wo die Bedingung $\Delta E \gg k_{\mathrm{B}}T$ erfüllt ist, stimmt der theoretische Wert gut mit den numerischen Daten überein.

In [29] wurde das Ummagnetisierungsverhalten eines einzelnen magnetischen Momentes numerisch untersucht. In diesem Fall konnten sowohl der analytische Vorfaktor als auch die Energiebarriere numerisch bestätigt werden.

5 Thermisch aktivierte Ummagnetisierung in Nanostrukturen

In diesem Kapitel werden mögliche thermisch aktivierte Ummagnetisierungsmoden in zylindrischen Systemen systematisch untersucht. Hierzu werden als einfache Modellsysteme zunächst Spinketten betrachtet. In Abhängigkeit von der Systemlänge treten hierbei unterschiedliche Ummagnetisierungsmoden wie kohärente Rotation und Nukleation auf. Für die Spinkette existieren für den Fall, daß die Dipol-Dipol-Wechselwirkung vernachlässigt wird, analytische Lösungen für die charakteristische Zeit sowie für die Energiebarrieren, welche numerisch bestätigt werden. Die Übergänge zwischen den Moden werden analytisch bestimmt und teilweise numerisch bestätigt.

Im Anschluß daran wird der Einfluß der langreichweitigen Dipol-Dipol-Wechselwirkung numerisch untersucht. Diese Untersuchungen beschränken sich nicht nur auf die Spinkette, sondern werden auf Zylinder und Ellipsoiden ausgeweitet. In diesen Systemen tritt ein weiterer Ummagnetisierungsmode auf, der als *Curling*-Mode bezeichnet wird.

5.1 Spinkette

Für die numerischen Untersuchungen thermisch aktivierter Ummagnetisierungsprozesse wird als Modellsystem zunächst eine klassische Spinkette gewählt. Dieses Modell beschreibt einen Zylinder mit dem Durchmesser D, der für kleine Durchmesser quasi eindimensional wird. Dieses Modell ist für die numerischen Untersuchungen interessant, da in ihm unterschiedliche Ummagnetisierungsmoden auftreten können. Die in diesem Kapitel betrachtete Spinkette, die in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt ist, besteht aus magnetischen Momenten und besitzt zwei uniaxiale Anisotropieachsen, eine leichte x-Achse und einer harte z-Achse. Die Anisotropien könnten verursacht werden sowohl durch die Formanisotropie als auch durch die kristalline Anisotropie des Systems [44]. Sie sollen den Einfluß der Dipol-Dipol-Wechselwirkung beinhalten mit der Stärke $d_x \approx w\pi$ [43][1] mit w aus Gleichung 2.3. Diese Näherung folgt aus einem Vergleich der Streufeldenergie eines unendlich ausgedehnten Rotationsellipsoiden

[1] Diese lokale Näherung der magnetostatischen Energie führte dazu, daß Aharoni [96] dieses Modell stark kritisiert hat.

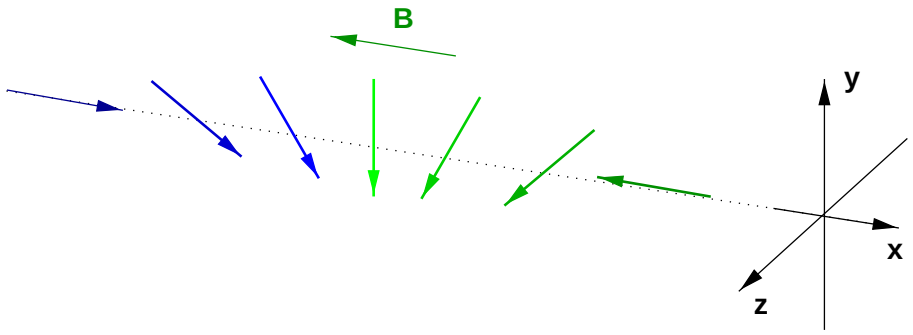


Abbildung 5.1: Dargestellt ist eine Spinkette. Es ist eine Domänenwand skizziert, der sich die magnetischen Momente in der xy-Ebene drehen. Das Magnetfeld $\mathbf{B}$ ist antiparallel zur leichten x-Achse angelegt. Bei der z-Achse handelt es sich um die harte Achse.

[4] mit der Energie einer Spinkette mit uniaxialer Anisotropie. Alternativ kann Sie analytisch für eine unendlich lange Spinkette berechnet werden, indem die Dipolwechselwirkungsenergien der in Abbildung 5.2 für zwei magnetische Momente dargestellten Zustände miteinander verglichen werden.

Die rechts dargestellte Konfiguration ergibt sich zu

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{w,\rightarrow} &= -\frac{\mu_0}{8\pi}\sum_{i,j}\frac{3\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j-\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j}{a^3|i-j|^3} = -2N\frac{\mu_0\mu_s^2}{4\pi a^3}\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{i^3}\\ &= -2Nw\zeta(3),\end{aligned} \tag{5.1}$$

wobei die Riemannsche Zeta-Funktion verwendet wird,

$$\zeta(3)=\sum_{i}^{\infty}\frac{1}{i^3}\approx 1.202. \tag{5.2}$$

Die links dargestellten Konfiguration ergibt

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{w,\uparrow} &= -\frac{\mu_0}{8\pi}\sum_{i,j}\frac{-\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j}{a^3|i-j|^3}\\ &= Nw\zeta(3),\end{aligned} \tag{5.3}$$

so daß sich die Energieänderung $\Delta\mathcal{H}_w$ ergibt zu

$$\Delta\mathcal{H}_w=\mathcal{H}_{w,\uparrow}-\mathcal{H}_{w,\rightarrow}=3Nw\zeta(3) \tag{5.4}$$

(siehe [80] für entsprechende Rechnungen in zweidimensionalen Systemen). Die Stärke der Anisotropie wird in diesem Fall genähert durch $d_x\approx 3\zeta(3)w$, d. h. daß sich die Dipolwechselwirkungsenergien im diskreten Fall von der Kontinuumsbeschreibung leicht unterscheiden[2]. Die zugehörige Energie der Spinkette

[2]Dies ist ein Beispiel für einen Fall, indem die in Kapitel 2.2 vorgestellte Argumenta-

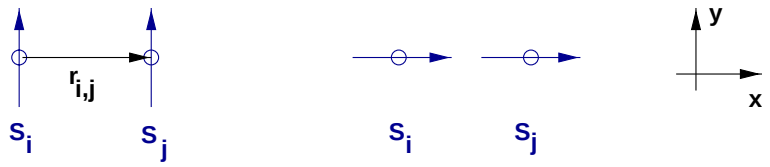


Abbildung 5.2: Dargestellt sind zwei magnetische Momente $\mathbf{S}_i$ und $\mathbf{S}_j$ einer Spinkette. $\mathbf{r}_{i,j}$ ist der Abstandsvektor. Die linke Konfiguration stellt den Fall dar, daß die magnetischen Momente senkrecht zur Kette orientiert sind, und der rechte, daß die magnetischen Momente in Richtung der Kette liegen.

hat die Form

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mu_s \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i - d_x \sum_i S_{i,x}^2 + d_z \sum_i S_{i,z}^2. \tag{5.5}$$

Das Magnetfeld $\mathbf{B}$ liegt stets parallel zur leichten x-Achse an. Die Anisotropiekonstanten werden zu $d_x = 0.1J$ und $d_z = J$ gewählt. In den folgenden Simulationen werden periodische Randbedingungen angenommen. Für das betrachtete Modell gibt es zwei Extremfälle der Ummagnetisierungsmoden, die kohärente Rotation und die Nukleation [11, 43, 44, 97]. Für kleine Systemlängen rotieren alle magnetischen Momente gleichförmig, um die Energie des Systems während des Ummagnetisierungsvorgangs zu minimieren. Im Fall großer Systemlängen ist es energetisch günstiger, daß sich das System in zwei oder mehrere Teile mit entgegengesetzt ausgerichteten magnetischen Momenten parallel zur leichten Achse teilt. Bei diesem Ummagnetisierungsmechanismus wird durch die Nukleation und die daraus resultierende Domänenwandbewegung die Anisotropieenergie erniedrigt.

Bevor diese Ummagnetisierungsmoden numerisch untersucht werden, wird nochmals gezeigt, daß die numerischen Daten der Monte-Carlo-Simulationen mit denen der Langevin-Dynamik im Fall hoher Dämpfung zusammenfallen. Dazu wird in Anlehnung an die Untersuchungen in [29] die Abhängigkeit der charakteristischen Zeit von der Dämpfungskonstanten α einer Spinkette der Länge $L = 80$ Spins mit beiden Verfahren numerisch untersucht. Die zugehörigen numerischen Ergebnisse sind in der Abbildung 5.3 dargestellt. Jeder Datenpunkt ist der Mittelwert über 1000 unabhängige Monte-Carlo-Läufe. Im Fall hoher Dämpfung konvergieren die Monte Carlo- und die Langevin-Dynamik-Daten, während sie im Fall kleiner Dämpfungskonstanten stark voneinander abweichen. Für die folgenden Untersuchungen wird, wie schon in Kapitel 4.3, $\alpha = 4$ verwendet, da mit diesem Wert gewährleistet ist, daß die Monte-Carlo-Simulation und

tion zur Gleichheit der Dipolwechselwirkungsenergie in der kontinuierlichen und diskreten Beschreibung nicht erfüllt ist. In eindimensionalen Systemen ist die Argumentation mit der Kugel nicht möglich.

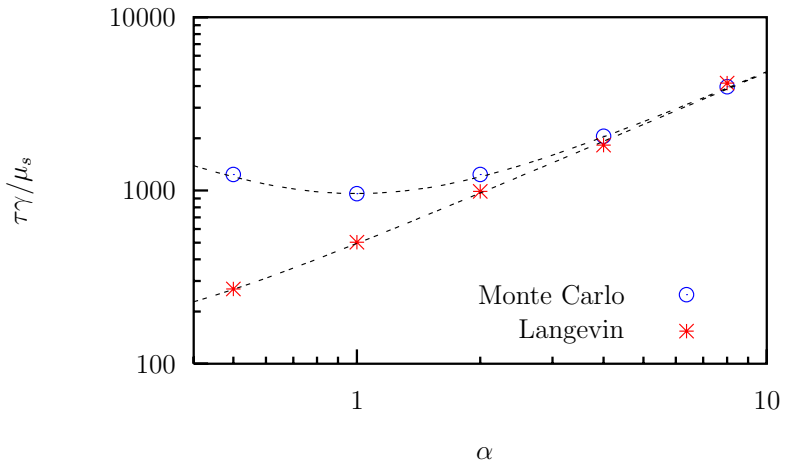


Abbildung 5.3: Reduzierte charakteristische Zeit $\tau\gamma/\mu_s$ in Abhängigkeit von der Dämpfungskonstanten α. Die Daten stammen aus Monte-Carlo- und Langevin-Dynamik-Simulationen für $k_\mathrm{B}T = 0.025J$ und $\mu_\mathrm{s}B_x = 0.15J$.

die numerische Integration der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung (siehe Gleichung 2.30) gleiche Zeitskalen besitzen. Ein weiterer Vorteil hoher Dämpfung besteht darin, daß es dann möglich ist, die numerisch gewonnenen charakteristischen Zeiten mit analytisch gewonnenen Formeln zum Beispiel für ein isoliertes Partikel oder eine Spinkette für den überdämpften Fall zu vergleichen. Da die Dämpfungskonstante experimentell als kleiner Eins bestimmt wurde [12, 41], ist dieser hohe Wert für die Dämpfungskonstante allerdings unphysikalisch. Er wird aber im folgenden aus den oben genannten Gründen trotzdem verwendet.

5.1.1 Kohärente Rotation

Zunächst wird der Fall kleiner Kettenlängen betrachtet, indem die magnetischen Momente kohärent rotieren, während sie die Energiebarriere ΔE überwinden. Dieser Ummagnetisierungsmechanismus ist anhand von Momentaufnahmen einer Spinkette zu verschiedenden Zeitpunkten in Abbildung 5.4 dargestellt. In dieser Abbildung ist die x-Komponente farbkodiert und der Übersichtlichkeit wegen senkrecht zur Kette gezeichnet: die magnetischen Momente, die sich in Richtung des angelegten äußeren Feldes orientiert haben, sind grün und die mit antiparalleler Orientierung sind blau dargestellt. Die Daten stammen aus einer Monte-Carlo-Simulation. Die zugehörige zu überwindende Energiebarriere ΔE entspricht der Energiebarriere ΔE_cr (siehe Gleichung 2.32) aus dem Stoner-Wohlfarth-Modell, welches in Kapitel 2.4 ausführlich beschrieben wird. Die charakteristische Zeit gehorcht dem im Kapitel 2.4 beschriebenen Aktivierungs-

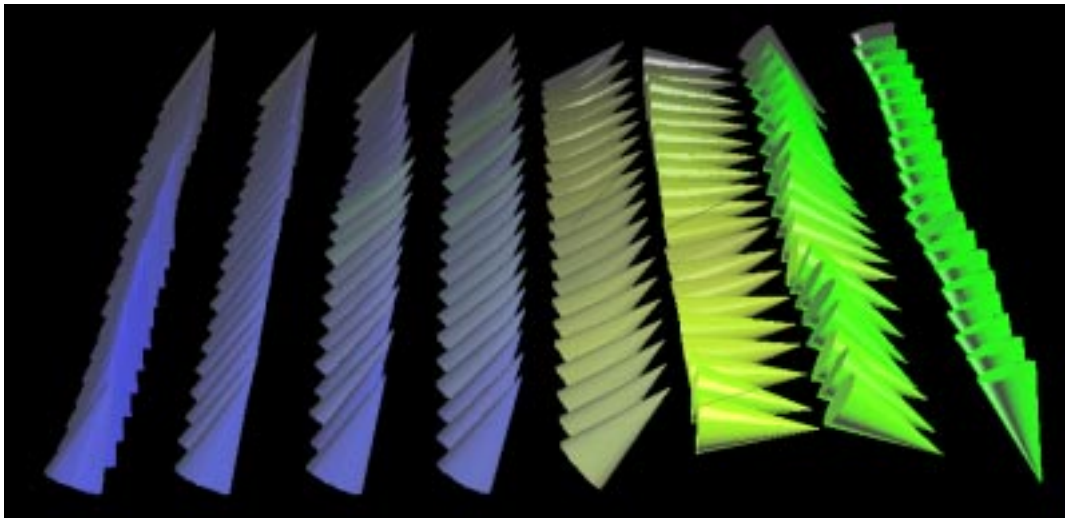


Abbildung 5.4: Momentaufnahme einer Spinkette zu verschiedenen Zeiten während des Ummagnetisierungsvorgangs mittels kohärenter Rotation. $L = 20$ Spins, $h = 0.75$ und $k_\mathrm{B}T = 0.0019J$.

gesetz (siehe Gleichung 2.38). Die für das betrachtete System entsprechende charakteristische Zeit wurden von Braun [11] mit Hilfe der Fokker-Planck-Gleichung bestimmt,

$$\tau^*_\mathrm{cr} = \frac{1+\alpha^2}{\alpha\gamma}\frac{\mu_\mathrm{s}}{d_x}\frac{\pi\sqrt{\frac{(1+h)d_x^2 d_z}{(1-h)d_x+1}}}{(d_x(1-h^2)-dz+\sqrt{(d_z+d_x(1-h^2))^2+4d_x d_z(1-h^2)})} \tag{5.6}$$

$$= \tau_\mathrm{Rel}\frac{\pi\sqrt{\frac{(1+h)d_x^2 d_z}{(1-h)d_x+1}}}{(d_x(1-h^2)-dz+\sqrt{(d_z+d_x(1-h^2))^2+4d_x d_z(1-h^2)})}, \tag{5.7}$$

wobei d_x und d_z die entsprechenden Anisotropiekonstanten sind. Dieser Vorfaktor setzt sich aus der Relaxationszeit τ_Rel eines einzelnen magnetischen Moments in einem Anisotropiefeld μ_s/d_x und einem Korrekturfaktor zusammen. Diese Gestalt des Vorfaktors wurde schon in Kapitel 2.4 anhand der Gleichung 2.39 diskutiert und tritt ebenfalls bei den analytischen Formeln des Vorfaktors der Nukleationsprozesse auf (vgl. Kapitel 5.1.2 und 5.1.3).

Die obigen Formeln gelten nur im Bereich sehr kleiner Temperaturen $k_\mathrm{B}T \ll \Delta E_\mathrm{cr}$ und für $\mu_\mathrm{s}B_x < 2d_x$ unter der Annahme, daß das System durch einen Freiheitsgrad beschrieben werden kann, nämlich der Orientierung des magnetischen Gesamtmoments des Systems, welches einen konstanten Wert besitzen muß. Für größere Magnetfelder verschwindet die Energiebarriere und es liegt ein nicht-thermischer Ummagnetisierungsprozeß vor.

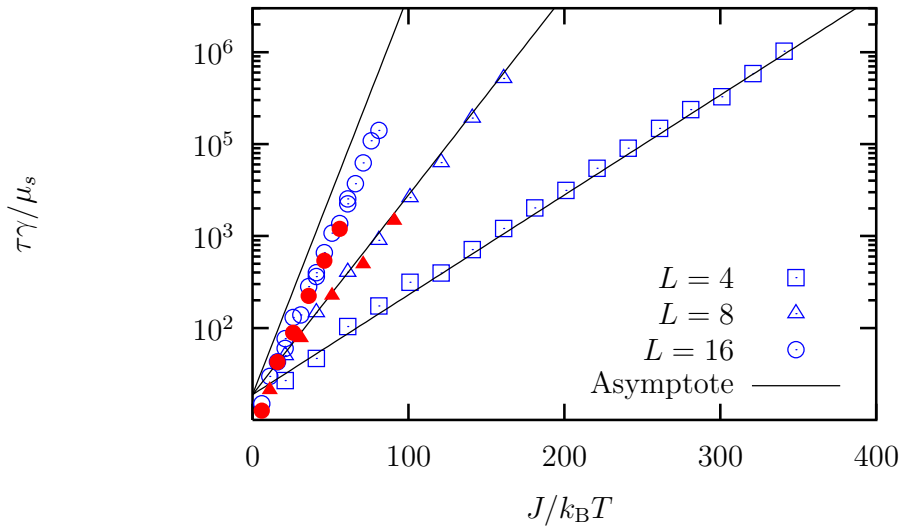


Abbildung 5.5: Reduzierte charakteristisch Zeit $\tau\gamma/\mu_s$ über der inversen Temperatur. Die Daten stammen von Monte-Carlo- (offene Symbole) und Langevin-Dynamik- (gefüllte Symbole) Simulationen für verschiedene Systemgrößen. Die durchgezogenen Linien sind die asymptotischen Formeln für die *escape*-Zeiten (siehe Gleichung 2.38 und Gleichung 5.7).

Die numerisch erhaltenen Daten für die charakteristische Zeit τ werden nun für den Fall der kohärenten Rotation mit den obigen Formeln verglichen. In der Abbildung 5.5 wird die Temperaturabhängigkeit der charakteristischen Zeit für einen vorgegebenen Wert für das reduzierte Feld $h = 0.75$ und drei verschiedene Systemgrößen dargestellt. Für Temperaturen $k_\mathrm{B}T < \Delta E_\mathrm{cr}$ bestätigen die numerischen Daten die asymptotische Lösung für kleine Systemgrößen. Für das größte hier gezeigt System ($L = 16$) sind die numerischen Daten systematisch kleiner als die theoretisch vorhergesagten. Offensichtlich hängt der Vorfaktor τ^*_cr von der Systemgröße ab, was in Widerspruch zu Gleichung 5.7 steht, während die Energiebarriere (siehe Gleichung 2.32), die durch die Steigung gegeben ist, korrekt ist. Die Größenabhängigkeit von τ^*_cr kann mit Hilfe der Temperaturabhängigkeit des absoluten Wertes der magnetischen Momente des ausgedehnten Systems erklärt werden. In einem ausgedehnten System wird die Energiebarriere ($\Delta E_\mathrm{cr} = d_x L(1-h)^2$, vgl. Gleichung 2.32) für kleine Felder, $d_x L$, reduziert $d_x\langle\sum_i (S_i^x)^2\rangle$. Die Entwicklung nach der Temperatur bis zur ersten Ordnung führt auf den Korrekturterm $d_x\langle\sum_i (S_i^x)^2\rangle \approx d_x L(1-ak_\mathrm{B}T)$. Wird dieser in Gleichung 2.38 eingesetzt, so wird der Vorfaktor τ^*_cr um einen Faktor $\exp(-ad_x L)$ reduziert. In ausgedehnten Systemen mit vielen Freiheitsgraden führt die Reduzierung der Magnetisierung also zu einer größenabhängigen Reduktion des Vorfaktors für tiefe Temperaturen [32].

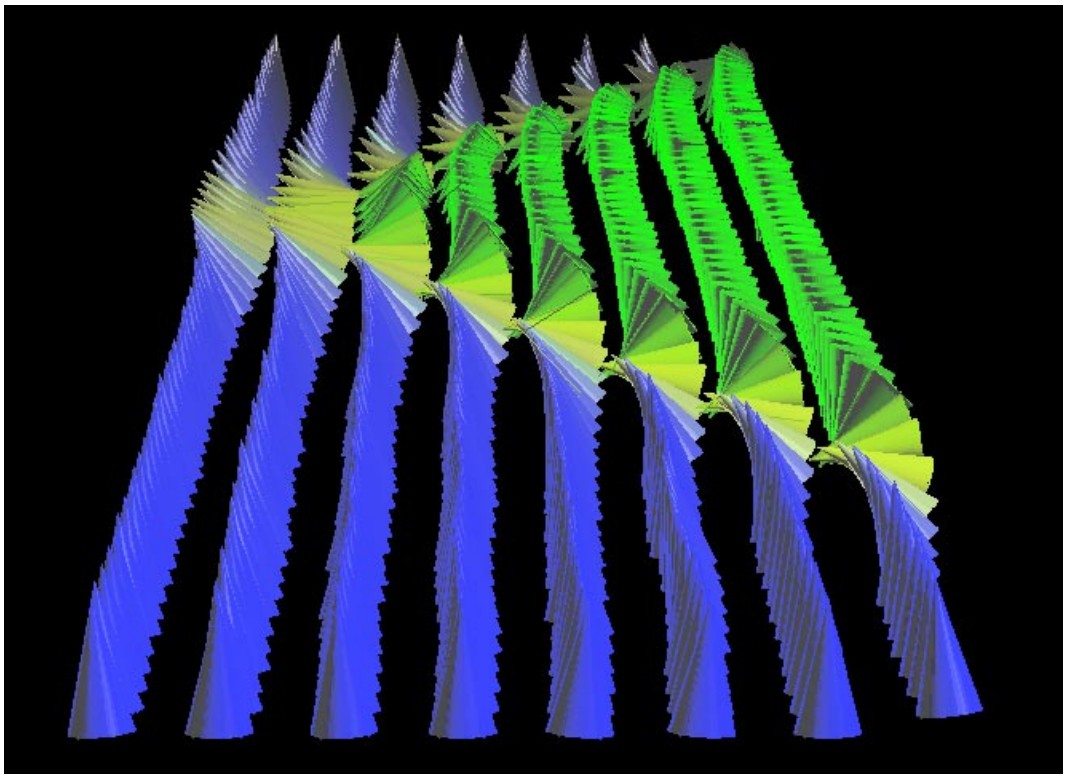


Abbildung 5.6: Momentaufnahme einer Spinkette zu verschiedenen Zeiten während eines Soliton-Antisoliton-Nukleationsprozesses. $h = 0.75$ und $k_\mathrm{B}T = 0.0019J$.

5.1.2 Soliton-Antisoliton-Nukleation

Mit zunehmender Länge der Kette tritt ein anderer, energetisch günstigerer Ummagnetisierungsmechanismus auf, nämlich die Soliton-Antisoliton-Nukleation, die von Braun [44] vorhergesagt wurde. Die Momentaufnahmen während eines solchen Ummagnetisierungsprozesses sind in Abbildung 5.6 für eine Spinkette der Länge $L = 80$ Spins dargestellt. Die Farbkodierung entspricht Abbildung 5.4. Es ist zu erkennen, daß aufgrund von thermischen Fluktuationen ein Nukleationskeim entstanden ist, aus dem sich zwei Domänenwände bilden. In diesem Fall zerfällt das System also in zwei Teile, in denen die Orientierung der Magnetisierung zueinander entgegengesetzt und parallel zur leichten Achse sind. Diese zwei Teile werden durch zwei Domänenwände voneinander getrennt, in denen die Drehrichtung in der xy-Ebene entgegengesetzt ist — ein sogenanntes Soliton-Antisoliton-Paar. Diese Domänenwände durchlaufen das System während des Ummagnetisierungsprozesses. Da hier ein System mit periodischen Randbedingungen simuliert wurde, hat sich ein Solitonen-Antisolitonen-Paar gebildet, während sich im Fall von offenen Randbedingungen ein einzelnes (Anti)Soliton an einem Ende der Spinkette ausbilden könnte.

Die zugehörige Energiebarriere ΔE_{nu}, die während des Ummagnetisierungsvorgangs überwunden werden muß, wurde von Braun [44] berechnet und hat die Form

$$\Delta E_{\mathrm{nu}} = 4\sqrt{2Jd_x}(\tanh r - hr), \tag{5.8}$$

mit $r = \operatorname{arcosh}(\sqrt{1/h})$. Im Grenzfall kleiner magnetischer Felder, $h \to 0$, hat diese Energiebarriere die Form $\Delta E_{\mathrm{nu}} = 4\sqrt{2Jd_x}$. Hierbei handelt es sich um die Energie zweier Domänenwände [4]. Die zugehörige charakteristische Zeit folgt wiederum dem Aktivierungsgesetz, welches durch Gleichung 2.38 beschrieben wird. Da für die Simulationen $\alpha = 4$ gewählt ist, wird zum Vergleich wieder der Vorfaktor für den überdämpften Fall herangezogen. Dies ist Gleichung 5.4 in [44]. In den hier verwendeten Einheiten hat der Vorfaktor dann die Form

$$\tau^*_{\mathrm{nu}} = \frac{(1+\alpha^2)}{\gamma\alpha}\frac{\mu_{\mathrm{s}}}{d_x}\frac{1}{L}\sqrt{\frac{2J}{d_x}}\sqrt{\frac{k_{\mathrm{B}}TJ}{4\sqrt{2Jd_x}}}\frac{\sqrt{\pi^3}}{|E_0(r)|\tanh r^{3/2}\sinh r} \tag{5.9}$$

$$= \tau_{\mathrm{Rel}}\frac{\delta}{L}\sqrt{\frac{E_{\mathrm{therm}}}{2E_{\mathrm{DW}}}}\frac{\sqrt{\pi^3}}{|E_0(r)|\tanh r^{3/2}\sinh r} \tag{5.10}$$

Der Eigenwert $E_0(r)$ wurde numerisch von Braun berechnet [44]. Im Grenzfall $h \to 1$ ist er $|E_0(r)| \approx 3r^2$. Der Vorfaktor setzt sich wiederum aus mehreren Anteilen zusammen. Die ersten beiden Faktoren liefern die Relaxationszeit eines einzelnen magnetischen Moments in einem Anisotropiefeld. Der Faktor δ/L spiegelt die Größenabhängigkeit der Nukleationswahrscheinlichkeit wieder, wobei $\delta = \sqrt{J/(2d_x)}$ die Domänenwandbreite ist. Je größer das System ist, desto wahrscheinlicher ist der Nukleationsprozeß. Weiterhin enthält die Formel das Verhältnis der thermischen Energie E_{therm} zur Domänenwandenergie E_{DW} zweier Domänenwände.

Abbildung 5.7 zeigt die Temperaturabhängigkeit der reduzierten charakteristischen Zeit für $h = 0.75$ und zwei unterschiedliche Systemlängen. Die obigen Formeln werden nur für ausreichend tiefe Temperaturen ($\Delta E_{\mathrm{nu}}/k_{\mathrm{B}}T > 8$ für das kleinere und $\Delta E_{\mathrm{nu}}/k_{\mathrm{B}}T > 10$ für das größere System) durch die Simulationsdaten bestätigt. Für hohe Temperaturen weichen sowohl die numerischen Daten, die aus der Monte-Carlo-Simulation stammen als auch diejenigen aus der Langevin-Dynamik-Simulation von der Formeln ab. In diesem Bereich liegt ein anderer Ummagnetisierungsmode vor, die sogenannte *multidroplet*-Nukleation [97]. Dieser Ummagnetisierungsmode hängt im Gegensatz zur Soliton-Antisoliton-Nukleation nicht nur von der Systemgröße ab sondern auch von der Temperatur. Er wird im nächsten Abschnitt dieses Kapitels vorgestellt.

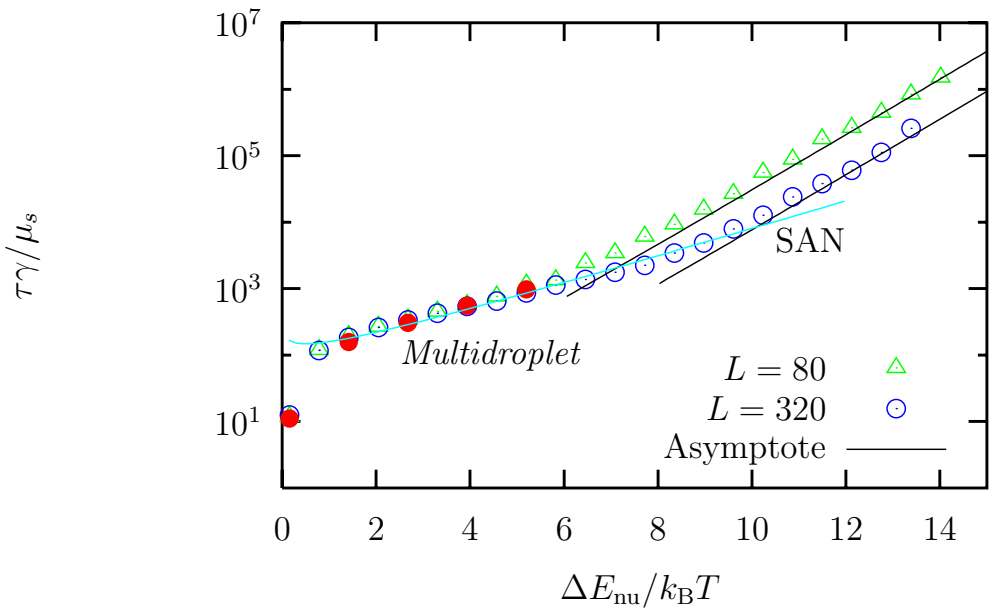


Abbildung 5.7: Reduzierte charakteristische Zeit $\tau\gamma/\mu_s$ über der inversen Temperatur $\Delta E_{\mathrm{nu}}/k_{\mathrm{B}}T$ für zwei verschiedene Systemgrößen. Die Datenpunkte stammen aus Monte-Carlo- (offene Symbole) und Langevin-Dynamik- (gefüllte Symbole) Simulationen. Die durchgezogenen Linien sind die asymptotischen Formeln der *escape*-Zeit für einen einzelnen Soliton-Antisoliton-Nukleationsprozeß (siehe Gleichungen 2.38, 5.8, und 5.10) und *multidroplet*-Nukleation (siehe Gleichung 5.13).

5.1.3 *Multidroplet*-Nukleation

Der Mechanismus der *multidroplet*-Nukleation ist in Abbildung 5.8 für eine Spinkette der Länge $L = 120$ Spins dargestellt. Es ist zu erkennen, daß sich in Abhängigkeit von der Temperatur (aber auch von anderen Größen, wie der Systemgröße und dem äußeren angelegten Magnetfeld) mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zeitgleich viele Nukleationszentren ausbilden. Aus diesen Nukleationszentren entstehen Domänenwände, die während des Ummagnetisierungsprozesses durch das System laufen. Aufgrund dieses Effektes wird dieser Mechanismus *mulitdroplet*-Nukleation genannt. Diese Ummagnetisierungsmode wurde bisher hauptsächlich im Zusammenhang mit Untersuchungen des Ising- Modells diskutiert [26, 98].

Die charakteristische Zeit τ_{mn} der *multidroplet*-Nukleation kann mit Hilfe der klassischen Nukleationstheorie [98, 99] berechnet werden. Bei den nachfolgenden Betrachtungen wird angenommen, daß gleichzeitig viele Nukleationskeime mit einer kritischen Größe entstehen. Diese sogenannten superkritischen Keime

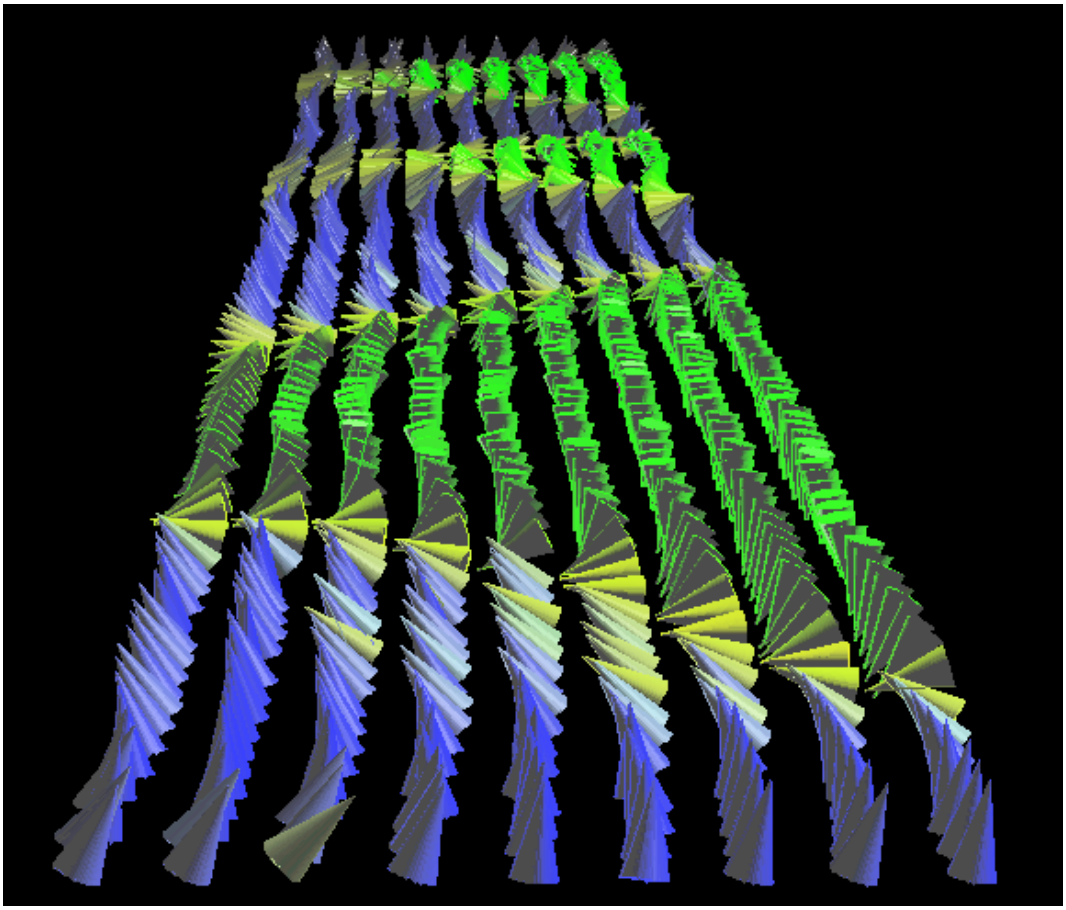


Abbildung 5.8: Momentaufnahme einer Spinkette zu verschiedenen Zeiten während einer *multidroplet*-Nukleation. $h = 0.95$ und $k_\mathrm{B}T = 0.038J$.

wachsen und verbinden sich miteinander und führen so auf einen Ummagnetisierungsprozeß. Die charakteristische Zeit bei einem solchen Prozeß hängt von der Wahrscheinlichkeit ab, daß ein superkritischer Nukleationkeim entsteht und von der Zeit, die für das anschließende Wachstum des Keims verbleibt. Es wird angenommen, daß der Radius des superkritischen Keims linear mit der Zeit t wächst. Die Änderung der Magnetisierung ΔM ist [24]

$$\Delta M(\tau_) = \int_0^\tau \frac{(2vt)^D}{\tau_\mathrm{nu}} \mathrm{d}t = L^D \tag{5.11}$$

nach einer Zeit τ in D Dimensionen. Hierin ist v die Domänenwandgeschwindigkeit. Die Zeit, zu der die Hälfte des Systems ($L^D/2$) ummagnetisiert ist, wird gegeben durch

$$\tau_\mathrm{mn} = (\frac{L}{2v})^{\frac{D}{D+1}} ((D+1)\tau^*_\mathrm{nu})^{\frac{1}{D+1}} \exp \frac{\Delta E_\mathrm{nu}}{(D+1)k_\mathrm{B}T}. \tag{5.12}$$

Für das hier betrachtete eindimensionale System ist die charakteristische Zeit gegeben durch

$$\tau_{\mathrm{mn}} = \sqrt{\frac{L\tau_{\mathrm{nu}}^*}{v}} \exp \frac{\Delta E_{\mathrm{nu}}}{2k_{\mathrm{B}}T}. \tag{5.13}$$

Dies bedeutet, daß die (effektive) Energiebarriere für die *multidroplet*-Nukleation um einen Faktor 1/2 reduziert ist und der Vorfaktor τ_{mn}^* nicht länger von der Systemgröße abhängt, im Gegensatz zum Vorfaktor τ_{nu}^* der Soliton-Antisoliton-Nukleation, welcher eine $1/L$-Abhängigkeit (siehe Gleichung 5.10) besitzt. Für den Vergleich in Abbildung 5.7 wird die Domänengeschwindigkeit in einer Spinkette benötigt, die berechnet werden kann für den Fall, daß thermische Fluktuationen [58] vernachlässigt werden. Für kleine Felder wird die Domänenwandgeschwindigkeit gegeben durch

$$v = \frac{\gamma\alpha\mu_{\mathrm{s}}B_x}{1+\alpha^2}\sqrt{\frac{J}{2d_x}} = \frac{1}{\tau_{\mathrm{Rel}}}\delta. \tag{5.14}$$

Die Geschwindigkeit ist also das Verhältnis der Domänenwandbreite zur Relaxationszeit. Obwohl zur Berechnung dieser Beziehung thermische Fluktuationen vernachlässigt wurden, wird sie im folgenden verwendet. Die entsprechenden Werte für die Domänenwandgeschwindigkeit für $\mu_{\mathrm{s}}B_x = 0.15J$ ist in den verwendeten Einheiten $v = 0.038$ Spins pro reduzierte Zeiteinheit.

In Abbildung 5.7 wird die Gültigkeit von Gleichung 5.13 bestätigt. Außerdem ist eindeutig zu sehen, daß der Vorfaktor nicht von der Systemgröße abhängt, da die Daten für beide Systemgrößen zusammenfallen. Ein ähnliches Verhalten wurde für den Übergang von der *single*- zur *mulitdroplet*-Nukleation bei Untersuchungen des Ising-Modells gefunden, sowohl für die Feldabhängigkeit [22–24] als auch für die Temperaturabhängigkeit [26].

5.1.4 Übergänge zwischen den Ummagnetisierungsmoden

Die Übergänge zwischen den in den vorangegangenen Abschnitten vorgestellten Ummagnetisierungsmoden sollen nun näher diskutiert werden. Zunächst wird der Übergang von der *single*- zur *mulitdroplet*-Nukleation (MDN) herausgegriffen. Der von der Systemgröße abhängige Übergang zwischen diesen beiden Ummagnetisierungmechanismen wird durch einen Vergleich der charakteristischen Zeiten erhalten. Die Bedingung für den Übergang ergibt sich zu

$$L_{\mathrm{sm}} = \sqrt{v\tau_{\mathrm{nu}}^* L_{\mathrm{sm}}} \exp \frac{\Delta E_{\mathrm{nu}}}{2k_{\mathrm{B}}T}. \tag{5.15}$$

Wie schon beschrieben wurde, läuft ein Nukleationsprozeß wie folgt ab: Zunächst entstehen in einem System aufgrund von thermischen Fluktuationen

Keime. Wenn diese Keime eine superkritische Größe erreicht haben, wachsen diese Keime immer weiter. Die Zeit, die diese superkritischen Keime benötigen, um durch das System zu laufen, wird gegeben durch L_{sm}/v. Soliton-Antisoliton-Nukleation liegt vor, wenn in der Zeit, wo sich ein superkritischer Keim ausbildet und mit der Domänenwandgeschwindigkeit durch das System läuft, keine weiteren superkritischen Keime entstehen. Ist das System so groß, daß sich gleichzeitig mehrere superkritischen Keime ausbilden können, so liegt die *multidroplet*-Nukleation vor.

Der interessantere Übergang ist der zwischen kohärenter Rotation und Soliton-Antisoliton-Nukleation (SAN). Um diese Übergangslinie zu erhalten, wird die Energiebarriere der Soliton-Antisoliton-Nukleation (siehe Gleichung 5.8) mit derjenigen der kohärenten Rotation (siehe Gleichung 2.32) verglichen, da dies eine Bedingung für den Mechanismus mit der niedrigsten Aktivierungsenergie liefert.

Die zugehörige Übergangslinie[3] L_{c} ergibt sich zu

$$L_{\mathrm{c}} = \frac{4\sqrt{2J}(\tanh r - hr)}{\sqrt{d_x}(1-h)^2}. \tag{5.16}$$

Für den Fall, daß die Magnetfelder gegen Null gehen, entspricht die Übergangslinie, $L_c = 4\sqrt{2J/d_x}$, der Domänenwandenergie zweier Wände. Die Übergangslinie entspricht also der Systemlänge, bei welcher es erstmals möglich ist, daß sich zwei Domänenwände in dem System ausbilden können. Wird diese Länge unterschritten, können sich keine Domänenwände bilden, und das System rotiert kohärent.

In Abbildung 5.9 ist ein Diagramm dargestellt, welches die in einer Spinkette auftretenden Ummagnetisierungsmechanismen in Abhängigkeit der Systemgröße und des Magnetfelds zeigt. Die Übergangslinie L_{c}, die oben berechnet wurde, trennt den Bereich der kohärenten Rotation von dem der Soliton-Antisoliton-Nukleation. Für $h > 1$ ist der Ummagnetisierungsprozeß nicht thermisch, d. h. daß keine Energiebarriere vorhanden ist. Im Bereich der Nukleation setzt im Bereich hoher Magnetfelder ein temperaturabhängiger Übergang zur *multidroplet*-Nukleation ein. Je kleiner die Temperatur ist, desto mehr verschwindet dieser Bereich. In der Abbildung ist diese Übergangslinie L_{sm} beispielhaft für $k_{\mathrm{B}}T = 0.006J$ eingezeichnet.

[3] Diese Übergangslinie wurde ebenfalls von Braun berechnet, allerdings unter einer etwas anderen Annahme [100]. Er berechnet die Systemgröße unterhalb der keine nichthomogene Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung existiert. Braun erhält für den Übergang folgende Bedingung $L_{\mathrm{c}} = \pi\sqrt{\frac{2J}{d_x(1-h^2)}}$. In diesem Fall ergibt sich für verschwindende Felder $L_{\mathrm{c}} = \pi\sqrt{2J/d_x}$. Die auf diese Weise gewonnene Übergangslinie liegt höher als die durch den direkten Vergleich der Energiebarrieren gewonnene.

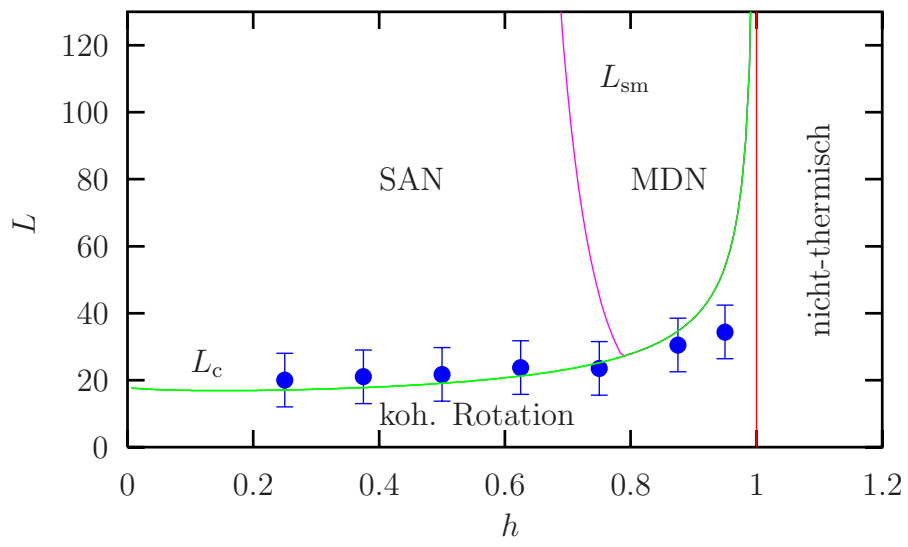


Abbildung 5.9: Das Diagramm zeigt Bereiche der unterschiedlichen Ummagnetisierungsmechanismen. Die Linien entsprechen den Gleichungen 5.16 und 5.15. Die Punkte stammen aus Monte-Carlo-Simulationen und bestätigen Gleichung 5.16.

Um Gleichung 5.16 numerisch zu bestätigen, wird die Korrelationsfunktion

$$c_y(L/2) = \Big[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i^y(\tau) S_{i+L/2}^y(\tau)\Big]_{\mathrm{av}}$$

während des Ummagnetisierungsvorgangs berechnet. Hierbei handelt es sich um die Korrelationsfunktion der y-Komponente zweier Spins in einem Abstand von $L/2$ zur Zeit τ. Dieser Abstand ist die maximale Distanz, die in einem System mit periodischen Randbedingungen auftreten kann. In Abbildung 5.10 ist dieser Sachverhalt zur Verdeutlichung skizziert.

Mit Hilfe dieser Korrelationsfunktion kann der Ummagnetisierungsvorgang charakterisiert werden. In Abbildung 5.11 ist die Systemgrößenabhängigkeit von $c_y(L/2)$ für drei verschiedene Magnetfeldwerte dargestellt. Für die kohärente Rotation ist der Grenzwert für $c_y(L/2)$ eins, da zur Zeit τ alle magnetischen Momente in y-Richtung orientiert sind (kleine Systeme). Im Fall der Nukleation ist das System in zwei Teile mit Orientierung der magnetischen Momente in $\pm x$-Richtung, so daß der Grenzwert für die Korrelation in y-Richtung in diesem Fall Null ist (große Systeme). Als Bedingung für den Übergang von kohärenter Rotation zu Nukleation wird der Wert 1/2 der Korrelationsfunktion gewählt, und die zugehörige Systemgröße wird als Übergangslänge definiert. So werden die Werte für die Übergangslinie L_{c} numerisch gewonnen. Die gewonnenen Daten sind ebenfalls in Abbildung 5.9 dargestellt.

Die Monte-Carlo-Daten bestätigen die analytisch bestimmte Übergangslinie L_{c}. Nur im Bereich hoher Magnetfelder weichen die numerischen Daten von der

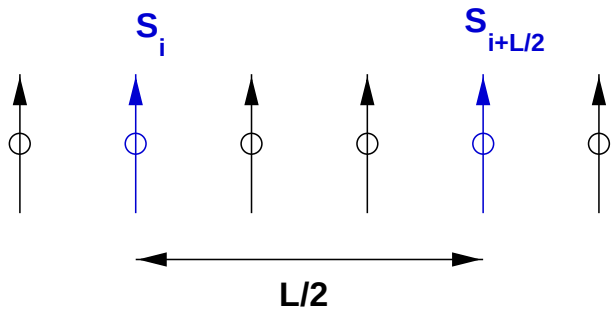


Abbildung 5.10: Dargestellt ist ein periodisches System der Länge $L = 6$ Spins zur Verdeutlichung der Korrelationsfunktion. Exemplarisch sind zwei magnetischen Momente S_i und $S_{i+L/2}$ farbig hervorgehoben.

analytisch bestimmten Kurve ab, die im Grenzfall $h \to 1$ divergiert. In diesem Bereich tritt ein gemischter Ummagnetisierungsmechanismus auf: Zunächst rotieren die magnetischen Momente kohärent bis zu einem gewissen Winkel, bei dem dieser Mechanismus instabil wird und ein Soliton-Antisolitonen-Paar entsteht. Offensichtlich ist in diesem Bereich die kohärente Rotation instabil. Ein Hinweis auf diesen kombinierten Ummagnetisierungsmechanismus liefert auch Abbildung 5.11. Für $h = 0.95$ nimmt die Korrelationsfunktion nicht den Wert Null im Bereich großer Systeme an, sondern besitzt einen endlichen Wert, der auf die Tatsache zurückzuführen ist, daß das System ersteinmal unter einem bestimmten Winkel kohärent rotiert, bevor der Nukleationsprozeß einsetzt.

Mit Hilfe der Abbildung 5.12 werden die Übergänge zwischen den unterschiedlichen Ummagnetisierungsmoden nochmals zusammenfassend dargestellt. Anhand der Abhängigkeit der reduzierten charakteristischen Zeit von der Systemgröße für zwei verschiedene Temperaturen wird der Einfluß der Moden auf die thermische Stabilität des Systems diskutiert.

Betrachtet wird zuerst der Fall kleiner Systemgrößen, in welchem die magnetischen Momente kohärent rotieren. Die zugehörige Energiebarriere ΔE_{cr} (Gleichung 2.32) ist proportional zur Systemgröße L. Da der Vorfaktor τ^*_{cr} nach Gleichung 5.7 nicht L-abhängig ist, bewirkt die Abhängigkeit der Energiebarriere einen exponentiellen Anstieg von τ mit der Systemgröße, der in Abbildung 5.12 dargestellt ist. Die numerischen Daten weichen leicht von diesem analytischen Verlauf ab. Dies hängt damit zusammen, daß der Vorfaktor der kohärenten Rotation, wie bereits früher diskutiert wurde, doch von der Systemlänge abhängt, da die Magnetisierung in ausgedehnten Systemen nicht konstant ist. Dieses Abhängigkeit war auch in Abbildung 5.5 zu erkennen.

Im Bereich der Soliton-Antisoliton-Nukleation hängt die Energiebarriere ΔE_{nu} (Gleichung 5.8) nicht von der Systemlänge ab, im Gegensatz zum Vorfaktor τ^*_{nu} (Gleichung 5.10), der eine $1/L$-Abhängigkeit besitzt. Dies führt zu einer

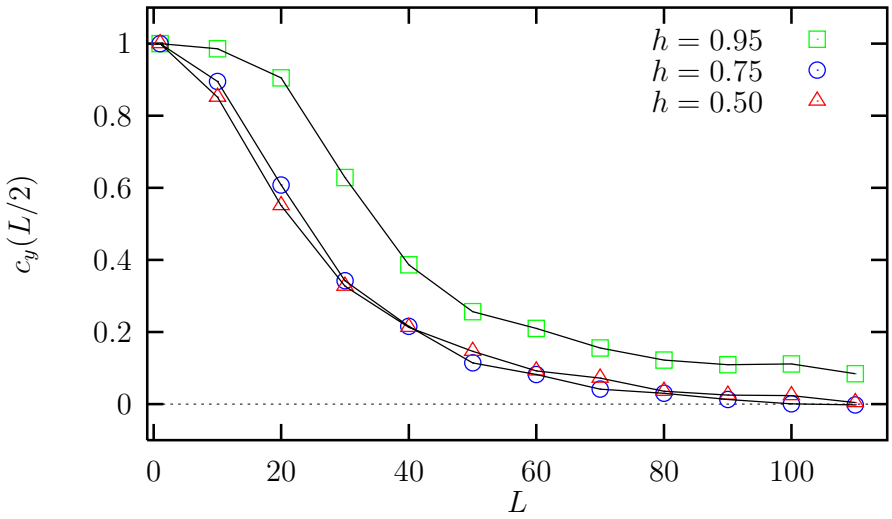


Abbildung 5.11: Systemgrößenabhängigkeit von $c_y(L/2)$ für verschiedene Magnetfelder. $k_\mathrm{B}T = 0.1 \ldots 0.004J$ in Abhängigkeit von h.

Abnahme der charakteristischen Zeit mit zunehmender Systemgröße. In der Nähe der Übergangslinie L_c (siehe Gleichung 5.16), welche die kohärente Rotation von der Soliton-Antisoliton-Nukleation trennt, besitzt die charakteristische Zeit ein Maximum.

Die charakteristische Zeit fällt solange mit zunehmender Systemlänge ab bis die Übergangslänge L_sm (Gleichung 5.15) erreicht ist, wo der Übergang von der einfachen Nukleation zur *multidroplet*-Nukleation stattfindet. In diesem Bereich ist die charakteristische Zeit konstant mit zunehmender Systemgröße, da sowohl der Vorfaktor τ^*_mn (Gleichung 5.13) als auch die Energiebarriere ΔE_nu (Gleichung 5.8) unabhängig von der Systemgröße ist. Die numerischen Daten bestätigen den Verlauf der charakteristischen Zeit im Bereich der einfachen und *multidroplet*-Nukleation.

Interessant in diesem Zusammenhang ist noch, daß qualitativ das gleiche Verhalten in der Systemgrößenabhängigkeit der sogenannten dynamischen Koerzitivität gefunden wird. Hierunter wird das Koerzitivfeld verstanden, welches beim Durchlauf einer Hysteresekurve auf einer vorgegebenen Zeitskala τ beobachtetet wird: Hierzu wird die charakteristische Zeit τ (siehe Gleichung 2.38), mit deren Hilfe die drei Bereiche kohärente Rotation, einfache und *multidroplet*-Nukleation beschrieben werden können, nach $h(L)$ bei konstantem τ aufgelöst. Hieraus resultiert eine Zunahme im Bereich der kohärenten Rotation, ein Abfall im Bereich der einfachen Nukleation und ein konstanter Verlauf im Bereich der *multidroplet*- Nukleation. Dieses Verhalten entspricht qualitativ Messungen der dynamischen Koerzitivität von Barium-Ferrit-Partikeln [101].

Mit ähnlichen Überlegungen wurde ebenfalls die Übergangslinie L_c in dreidi-

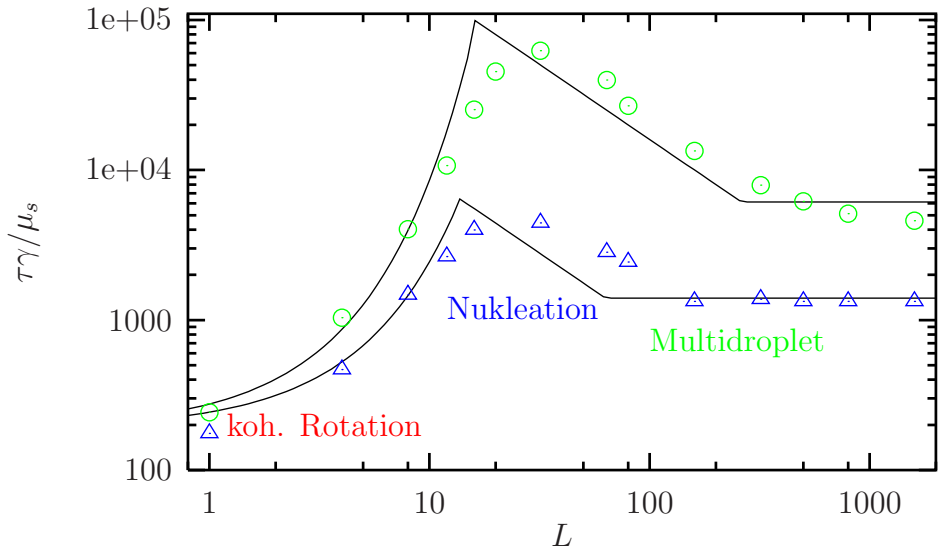


Abbildung 5.12: Reduzierte charakteristische Zeit $\tau\gamma/\mu_s$ über der Systemgröße L für zwei verschiedene Temperaturen ($k_\mathrm{B}T = 0.024J$ und $k_\mathrm{B}T = 0.016J$). Die durchgezogenen Linien sind die asymptotischen Formeln und die Datenpunkte stammen aus Monte-Carlo-Simulationen.

mensionalen Systemen bestimmt [25]. In diesem Fall ergibt sich die Übergangslinie im Limes $h \to 0$ zu $L_\mathrm{c}{=}3/2\sqrt{2J/d_x}$, während sie sich im Fall der Kette mit offenen Randbedingungen zu $L_\mathrm{c}{=}2\sqrt{2J/d_x}$ ergibt. Die Übergangslinie für CoPt-Partikel [25] ist in der Größenordnung von 30nm, was in Übereinstimmung mit experimentellen Werten von Co-Partikeln [17, 18] steht.

Bisher wurde das Ummagnetisierungsverhalten von Spinketten untersucht, in denen die magnetostatische Wechselwirkungsenergie in Form einer lokalen Näherung berücksichtigt wurde. Im nächsten Schritt sollen jetzt die die langreichweitige Dipol-Dipol-Wechselwirkung in den Simulationen berücksichtigt werden, da dies eine realistischere Beschreibung der betrachteten Systeme ist.

5.2 Spinkette mit Dipol-Dipol-Wechselwirkung

Der Einfluß der langreichweitigen Wechselwirkung auf den Ummagnetisierungsprozeß soll zunächst ebenfalls mit Hilfe einer Spinkette untersucht werden. Die hierzu verwendete Kette besitzt eine Länge von 128 Spins. Die zugehörige Energie hat die Form

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mu_s B_x \sum_i S_i^x - w \sum_{i<j} \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3}.$$

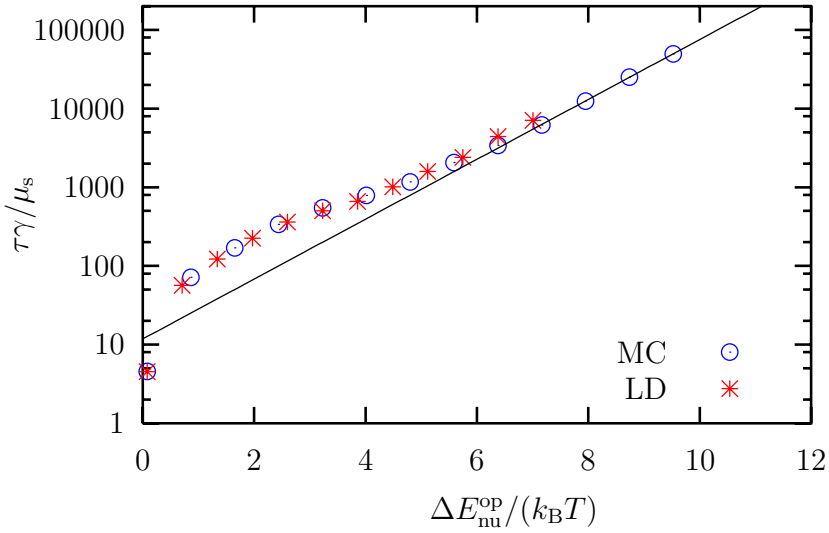


Abbildung 5.13: Reduzierte charakteristische Zeit $\tau\gamma/\mu_s$ über der inversen Temperatur $\Delta E_{nu}^{op}/k_B T$ aus Monte-Carlo- und Langevin-Dynamik-Simulationen. Die durchgezogene Linie entspricht der Anpassung im Bereich tiefer Temperaturen, um die Energiebarriere numerisch zu erhalten. $L = 128$, $\mu_s B_x = 0.15J$ und $w = 0.032J$

Um eine realistischere Beschreibung des Systems zu erhalten, wird nicht nur die Dipol-Dipol-Wechselwirkung berücksichtigt, sondern die Randbedingungen werden ebenfalls geändert: Es wird eine Spinkette mit offenen Randbedingungen untersucht. Zur Berechnung der Dipolsumme wird in den Simulationen die Fast-Fourier-Transformations-Methode verwendet, die in Kapitel 3.2 ausführlich beschrieben wurde. Die Änderung der Randbedingungen hat zur Folge, daß sich die zugehörige Energiebarriere ändert. Der Grund liegt darin, daß bei einem endlichen System der Nukleationsprozeß an den Enden der Probe einsetzt und unter Umständen nur ein (Anti)Soliton durch das System läuft. Dieser Ummagnetisierungsmechanismus führt zu der Energiebarriere [45]

$$\Delta E_{nu}^{op} = 2\sqrt{2dJ}(\tanh r - hr). \tag{5.17}$$

Wie schon am Anfang des Kapitels erwähnt wurde, wird die Dipol-Dipol-Wechselwirkung in dem hier verwendeten Modell der klassischen Spinkette durch eine uniaxiale Anisotropie der Form $-d\sum_i (S_i^x)^2$ mit $d \approx 3\zeta(3)w$ genähert.

Abbildung 5.13 zeigt die Temperaturabhängigkeit der reduzierten charakteristischen Zeit. Es sind sowohl Daten aus Monte-Carlo- als auch aus Langevin-Dynamik-Simulationen dargestellt. Beide Verfahren liefern die gleichen numerischen Resultate. Ein Nachteil bei der Untersuchung einer Spinkette mit offenen Rändern ist, daß für ein endliches System der Vorfaktor aus dem Aktivierungsprozeß (siehe Gleichung 2.38) nicht bekannt ist. Die Energiebarriere kann jedoch mit Gleichung 5.13 verglichen werden. Die Steigung der Kurven im Bereich tiefer

Temperaturen ergibt die Energiebarriere $0.88J$. Die mittels Anpassung an numerisch gewonnene Werte erhaltene Energiebarriere ist um 8% höher als die im Rahmen des Modells der Spinkette vorhergesagte ($\Delta E_{\mathrm{nu}}^{\mathrm{op}} = 0.1J$), die sich aus Gleichung 5.17 ergibt[4]. Die Ursache für die Abweichung liegt in der Näherung der Dipol-Dipol-Wechselwirkung, die der theoretisch gewonnenen Energiebarriere zugrunde liegt.

In [45] wurden die Energiebarrieren für Nukleationsprozesse (siehe Gleichung 5.8) mit gemessenen Energiebarrieren von isolierten Ni-Leiterbahnen [17, 18] verglichen. Bei diesem Vergleich wurde gefunden, daß die experimentelle Energiebarrieren um einen Faktor 3 niedriger liegen als die analytisch berechneten. Dieser Unterschied ist damit zu erklären, daß Nukleationsprozesse in realistischen Systemen stark von der Form der Enden abhängen.

Bisher wurde nur das Ummagnetisierungverhalten eindimensionaler Systeme diskutiert. Um realistischere Ergebnisse zu erhalten, sollen nun dreidimensionale Systeme unter Berücksichtigung der Dipol-Dipol-Wechselwirkung simuliert werden. An diesen Systemen soll untersucht werden, inwieweit sich die auftretenden Ummagnetisierungsmechanismen ändern.

5.3 *Curling*

Für die folgenden Untersuchungen werden dreidimensionale, zylindrische Systeme der Länge 128 Spins mit verschiedenen Durchmessern D herangezogen. Wie im Abschnitt davor, wird die Dipol-Dipol-Wechselwirkung berücksichtigt, jedoch keine uniaxiale Kristallanisotropie angenommen. In Abbildung 5.14 sind Momentaufnahmen von zwei simulierten System zur charakteristischen Zeit dargestellt. Im Fall des kleineren Durchmessers $D = 8$ Spins (linke Seite) entstehen zwei Nukleationszentren an den Enden, wodurch zwei Domänenwände entstehen, die das System durchqueren. Dieser Mechanismus ist vergleichbar mit dem Nukleationsprozeß in einer Spinkette, da alle magnetischen Momente in einer Ebene mehr oder weniger parallel zueinander stehen. Dies ist anhand der Querschnittsfläche zu erkennen, die ebenfalls in Abbildung 5.14 dargestellt ist. Jede dieser Ebenen kann dementsprechend als ein effektives magnetisches Moment in dem Modell der Spinkette [45] betrachtet werden, das in den vorangegangenen Abschnitten dieses Kapitels verwendet wurde.

Das Verhalten ändert sich jedoch für größere Durchmesser D, die oberhalb der sogenannten Austauschlänge l_{ex} liegen. Wie auch die Domänenwandbreite $\delta = \sqrt{J/2d}$ [4, 58] ist die Austauschlänge eine charakteristische Länge eines Materials, unterhalb der die langreichweitige Ordnung unter Umständen gebrochen

[4] Wird zur Berechnung der Anisotropie die Beziehung $d \approx \pi w$ verwendet, so ergibt sich eine Energiebarriere von $\Delta E_{\mathrm{nu}}^{\mathrm{op}} = 0.06J$. Dieser Wert liegt ebenfalls unterhalb des angepaßten Wertes.

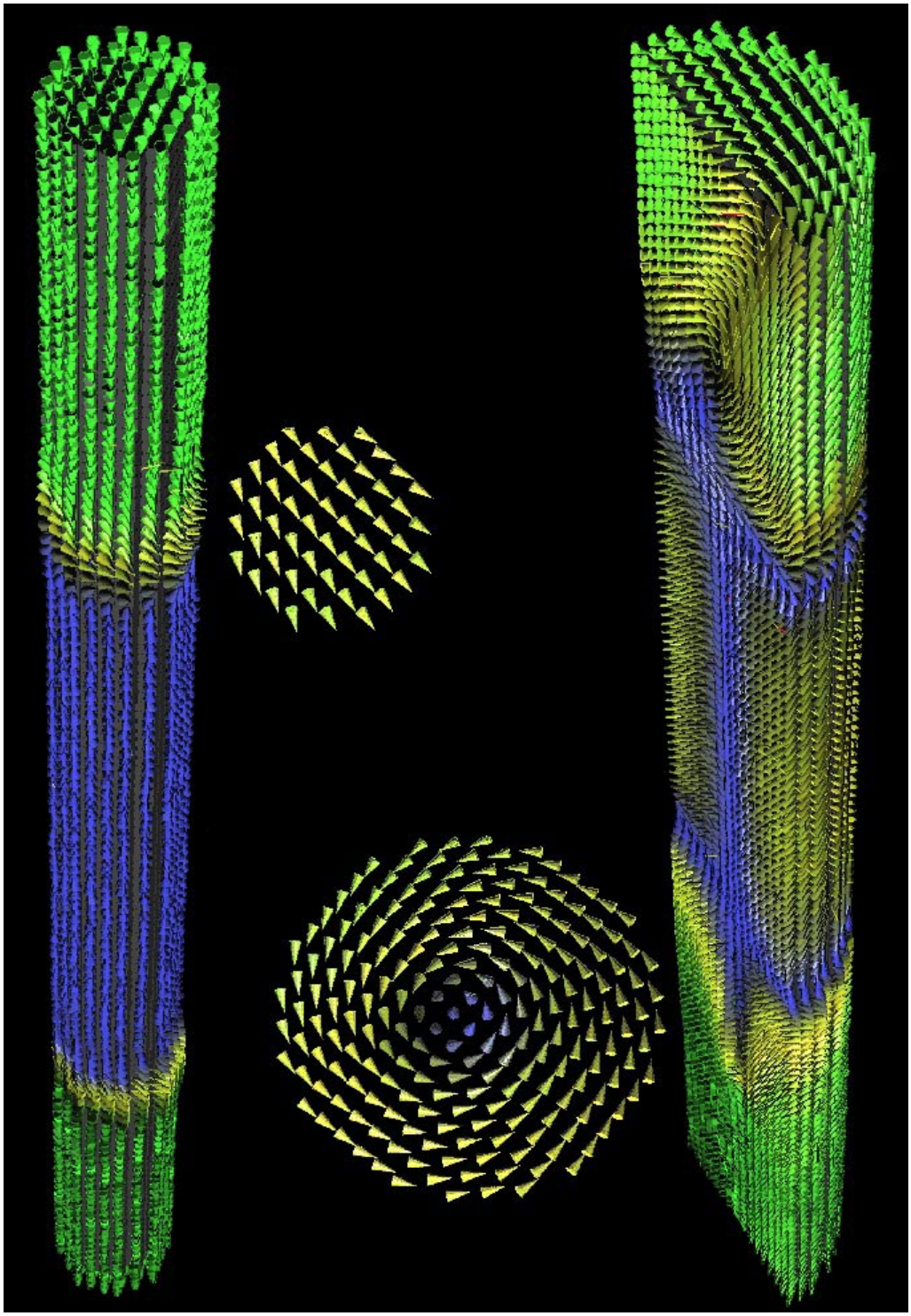


Abbildung 5.14: Momentaufnahmen von simulierten Spinsystemen zur Zeit τ für Endnukleation (links) und eine *curling*-ähnlichen Mode (rechts). Die x-Komponente der magnetischen Momente ist farbkodiert (grün: nach unten, blau: nach oben). Der Querschnitt auf der linken Seite zeigt eine Schicht in der unteren Domänenwand, während der auf der rechten Seite eine Schicht mit einem Vortex zeigt. $\mu_s B_x = 0.15J$, $w = 0.032J$, $L = 128$ und $k_\mathrm{B}T = 0.012J$. $D = 8$ (links) und 16 (rechts).

wird und das System in Domänen zerfällt. Die Energieerhöhung aufgrund einer 180°-Domänenwand auf der Längenskala l in einer Spinkette ist

$$\Delta E = J \sum_{i,j} (1 - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) = J \sum_{i,j} (1 - \cos(\theta_i - \theta_j)).$$

Die Entwicklung der cos-Funktion bis zur zweiten Ordnung liefert dann folgende Näherung für die Energie

$$\Delta E \approx J \sum_{i,j} \frac{(\theta_i - \theta_j)^2}{2} \approx \frac{J\pi^2}{2l} \tag{5.18}$$

unter der Annahme, daß die Änderung des Winkels θ zwischen allen benachbarten magnetischen Momenten konstant ist.

Die Energie des Dipolfelds einer Kette der Länge l ergibt sich aus Gleichung 5.4 zu höchstens $3wl\zeta(3)$. Der Vergleich dieser Dipolfeldenergie mit der Domänenwandenergie (siehe Gleichung 5.18) liefert die Austauschlänge

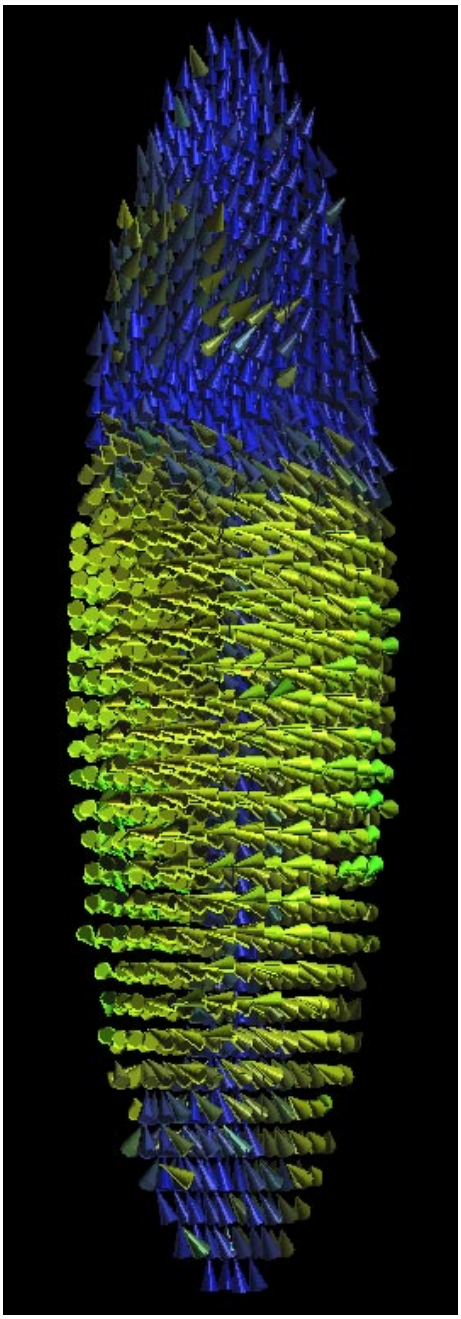
$$l_{\text{ex}} = \pi \sqrt{\frac{J}{6w\zeta(3)}}. \tag{5.19}$$

Die Austauschlänge für das hier betrachtete System ist $l_{\text{ex}} \approx 7$ Spins. Für Systeme, deren Durchmesser kleiner ist als diese Austauschlänge, ist es energetisch nicht günstig, inhomogene Magnetisierungsverteilungen innerhalb der Ebenen aufzubauen, während im Fall größerer Durchmesser andere Ummagnetisierungsprozesse wie zum Beispiel *Curling* auftreten können [96, 102].

Eine Momentaufnahme während eines Ummagnetisierungsprozesses in einem Partikel mit größerem Durchmesser ($D = 16$ Spins) ist ebenfalls in Abbildung 5.14 dargestellt. Der mittlere Teil des Zylinders ist in einem *Curling*-Mode, indem sich ein Vortex um eine zentrale Achse ausgebildet hat. In dieser Achse sind die magnetischen Momente noch in ihrer ursprünglichen Ausrichtung vorzufinden. Der in der Abbildung gezeigte Ummagnetisierungsprozeß ist ein Gemisch aus einem *Curling*-Mode und Nukleationsprozessen. Der Nukleationsprozeß setzt an den Enden der Probe ein, während der *Curling*-Prozeß im Mittelteil des Ellipsoiden startet. Im Querschnitt ist die Austauschlänge als eine typische Längenskala für die Domänenwandbreite in einem Vortex vorzufinden.

In Abbildung 5.15 ist der Ummagnetisierungsmechanismus in einem Rotationsellipsoiden dargestellt. Das umgebende System hat eine Größe von $10 \times 10 \times 40$. Das dargestellte Ergebnis resultiert aus Monte Carlo-Simulationen. Das äußere Magnetfeld ist entlang der leichten Achse angelegt, die nur durch die Dipol-Dipol-Wechselwirkung (Formanisotropie) hervorgerufen wird, da keine kristalline Anisotropie angenommen wird. Anhand von Gleichung 5.19 kann die Austauschlänge für die hier verwendeten Parameter zu $l_{\text{ex}} \approx 4$ Spins bestimmt werden. Der Durchmesser des Ellipsoiden ist größer als die Austauschlänge, so daß das Auftreten von *Curling* plausibel ist.

Abbildung 5.15: Momentaufnahmen eines Ummagnetisierungsvorgangs mittels *Curling* in einem Nanopartikel. Die x-Komponente des Systems ist farbkodiert (blau: nach oben, grün: nach unten). Der Ummagnetisierungsvorgang setzt in der Mitte des Partikels ein und bildet einen Vortex um eine Achse im System aus (siehe dazu untere Abbildung). Die magnetischen Momente in dieser Achse sind noch in der ursprünglichen Richtung ausgerichtet (blau). $k_{\mathrm{B}}T{=}0.1J$, $w{=}0.096J$ und $\mu_s B_x{=}0.3J$.



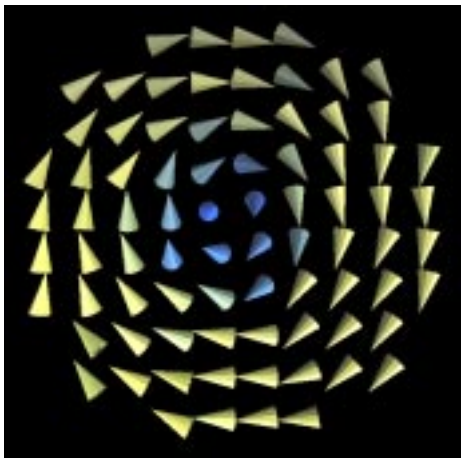


Abbildung 5.16: Darstellung der mittlere Querschnittsfläche des Ellipsoiden aus Abbildung 5.15. Die x-Komponente ist farbkodiert.

6 Ummagnetisierung in Co-Leiterbahnen

Die technische Entwicklung in den letzten 10 Jahren ermöglicht es, nanostrukturierte Leiterbahnen herzustellen, wofür Verfahren wie die Elektronendeposition [19, 20, 103–105] oder Elektronenstrahllithographie [106, 107] verwendet werden. Damit eröffnen sich neue Dimensionen für Entwicklungen im Bereich der Spinelektronik, wobei insbesondere dem Verständnis von Magnetowiderstandseffekten ein großes Interesse zukommt. Hierbei spielt das physikalische Verständnis der Wechselwirkung des Transportverhaltens von Elektronen mit den magnetischen Eigenschaften in nanostrukturierten Leiterbahnen eine große Rolle. Eine Änderung der Streuung der Leitungselektronen in Abhängigkeit vom Magnetisierungszustand des Systems bewirkt, daß sich der elektrische Widerstand des Systems ebenfalls ändert. Diese auftretenden Widerstandseffekte sollen in elektronischen Bausteinen wie Sensoren und Leseköpfen genutzt werden.

Kürzlich konnte gezeigt werden, daß Ummagnetisierungsprozesse in magnetischen Nanostrukturen mit Messungen des Magnetowiderstands untersucht werden können [108, 109]. Ebenfalls konnte gezeigt werden, daß der Magnetowiderstand von den Domänenstrukturen sowie den auftretenden Ummagnetisierungsmoden abhängt [110]. Mit der Messung des Magnetowiderstands beim Durchlaufen einer Hysterese ist es also zum einen möglich, die auftretenden Ummagnetisierungsprozesse zu charakterisieren, aber zum anderen auch den Magnetowiderstandseffekt zu verstehen.

In diesem Kapitel werden Ergebnisse aus Widerstandsmessungen an einzelnen Co-Leiterbahnen vorgestellt. In Anlehnung an die experimentell untersuchten Leiterbahnen werden dann Monte-Carlo-Simulationen von Systemen ähnlicher Geometrie durchgeführt, um einen Einblick in die auftretenden Ummagnetisierungsmoden zu erhalten. Aus dem Verständnis der auftretenden Moden können dann Rückschlüsse auf den Magnetowiderstand gezogen werden. Hierbei wird vor allem die Breitenabhängigkeit der auftretenden Moden untersucht.

6.1 Experimentelle Untersuchungen

Das Ummagnetisierungsverhalten von ferromagnetischen Drähten wird mit Hilfe des magnetooptischen Kerr-Effekts sowie mit Magnetowiderstandsmessungen experimentell untersucht. Bei diesen Untersuchungen ist es vorteilhaft, Messungen an einzelnen Leiterbahnen durchzuführen, um den Einfluß von Wech-

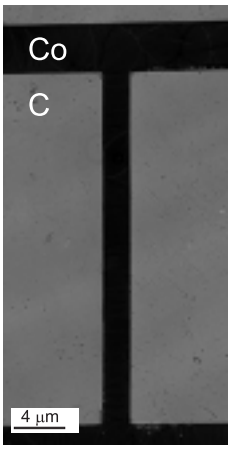


Abbildung 6.1: Die TEM-Aufnahme zeigt exemplarisch die Struktur einer Co-Leiterbahn auf einem C-Trägerfilm. Die Leiterbahn wurde mit Hilfe der Elektronenstrahllithographie hergestellt. Sie wird anhand von Magnetowiderstandsmessungen untersucht. Dargestellt ist eine Leiterbahn der Länge 30μm mit einer Dicke von 40nm sowie einer Breite von 2μm. [114]

selwirkungen zu vermeiden. In den meisten Fällen wurden bisher allerdings Nanodrähte untersucht, die auf einem Gitter angeordnet sind, so daß bei den Messungen die Wechselwirkung der parallel zueinander orientierten Drähte berücksichtigt werden muß [111].

Das Ummagnetisierungverhalten einzelner Co- bzw. Ni-Drähte wird mit *micro*-SQUID Messungen [19, 20] sowie mit der Messung des anisotropen Magnetowiderstands [104] untersucht. Bei der experimentellen Untersuchung von Ni-Drähten wurden sowohl Nukleationsprozesse als auch kohärente Rotation in Abhängigkeit vom Drahtdurchmesser gefunden [20]. Bei der Untersuchung von Co- und Ni-Nanodrähten mit größeren Durchmessern sind kompliziertere Nukleationsprozesse beobachtet worden [103, 104, 112], die mit Hilfe von mikromagnetischen Rechnungen vorhergesagt wurden [113]. Im folgenden werden Ergebnisse aus Widerstandsmessungen vorgestellt, die an einzelnen Co-Leiterbahnen an der Gerhard-Mercator-Universität in der Abteilung „Experimentelle Tieftemperaturphysik“ durchgeführt worden sind [106, 107, 114].

In Abbildung 6.1 ist eine Aufnahme einer mittels Elektronenstrahllithographie präparierten Co-Leiterbahn dargestellt, die mit Hilfe eines Transmissionselektronen-Mikroskops (TEM) aufgenommen wurde. Die Länge der untersuchten Leiterbahnen beträgt typischerweise 30 μm und die Dicke 40nm, während die Breite zwischen 200nm und 1 μm variiert wird. Die Morphologie der Leiterbahnen wird ebenfalls mit Hilfe des TEMs untersucht. Die Struktur von Co ist hier polykristallin, wobei die mittlere Korngrößen 7nm beträgt. Der Magnetowiderstand wird mit eine Vier-Punkt-dc-Technik gemessen. Dieser hängt von der Richtung und der Stärke des angelegten Magnetfeldes $\mathbf{B}$, sowie von der Magnetisierung $\mathbf{M}$ der Probe ab. Es werden drei Arten von Magnetowiderständen unterschieden, die verschiedene Ursachen haben: der Lorentz-Magnetowiderstand, der Domänenwandwiderstand sowie der anisotrope Magnetowiderstand.

Der Lorentz-Magnetowiderstand beruht auf der Lorentzkraft und tritt in allen

leitfähigen Materialien auf, die sich in einem Magnetfeld befinden [115]. Die Widerstandsänderung des Lorentz-Magnetowiderstands ist in den hier vorgestellten experimentellen Messungen bei kleinen Feldern von der gleichen Größenordnung wie die Genauigkeit der Messung, so daß er in der statistischen Schwankung der Magnetowiderstandsmessungen untergeht [114].

Ein weiterer Widerstandsbeitrag ist der Domänenwandwiderstand, der durch die Streuung von Elektronen an Domänenwänden verursacht wird. Der Einfluß des Domänenwandwiderstands ist sowohl experimentell als auch theoretisch noch unverstanden. Experimentell wurde sowohl eine Erhöhung des Widerstands durch Domänenwandstreuung [116, 117] als auch eine Erniedrigung [109, 118] gefunden. Theoretisch ergibt sich das gleiche Bild. Es wird sowohl eine Erhöhung [119–121] als auch eine Erniedrigung [121, 122] vorhergesagt.

Der anisotrope Widerstand tritt ebenfalls nur in ferromagnetischen Metallen oder Legierungen auf und hängt nicht direkt vom äußeren angelegten Magnetfeld, sondern von der relativen Orientierung der Magnetisierung $\mathbf{M}$ der Probe zur Stromrichtung ab. Der anisotrope Magnetowiderstand beruht auf der Anisotropie der Spin-Bahn-Streuung in ferromagnetischen Materialien [115, 123]. Fließt der Strom $\mathbf{I}$ parallel zur Magnetisierung in der Probe, so wird vom longitudinalen Magnetowiderstand gesprochen; fließt er senkrecht zur Magnetisierung, so handelt es sich um den transversaler Magnetowiderstand. Anhand von Messungen wurde gezeigt, daß der longitudinale anisotrope Magnetowiderstand größer ist als der transversale. Dies kann dadurch erklärt werden, daß die Streuwahrscheinlichkeit für Elektronen, die sich parallel zur Magnetisierungsrichtung bewegen, größer ist als für Elektronen, die sich senkrecht zur Magnetisierung bewegen.

In Abbildung 6.2 ist sowohl der longitudinale Magnetowiderstand $R(\alpha = 0°)$ als auch der senkrechte Magnetowiderstand $R(\alpha = 90°)$, der an einer 154nm breiten Co-Leiterbahn gemessen wurde, über dem Magnetfeld aufgetragen. Es ist zu erkennen, daß der Magnetowiderstand R für große Magnetfelder ($B \approx 4.2$ T) einen Sättigungswert R_s erreicht. Dieser Sättigungswert hängt von dem Winkel α zwischen der Magnetisierungs- und der Stromrichtung ab. Die Änderung des Sättigungswertes ΔR_s,

$$\Delta R_\mathrm{s} = \frac{R_\mathrm{s}(0°) - R_\mathrm{s}(90°)}{R_\mathrm{s}(0°)} \tag{6.1}$$

beträgt ungefähr 1%. Dies liegt in der Größenordnung, die für den anisotropen Magnetowiderstand erwartet wird [116].

Wird der Bereich niedriger Magnetfelder (-0.3 T $\leq$ B $\leq$ 0.3 T) des longitudinalen Widerstands näher betrachtet, so ist ein Hystereseeffekt zu erkennen. In Abbildung 6.3 ist der entsprechende Ausschnitt für eine 154nm breite Leiterbahn dargestellt, wobei der longitudinale Magnetowiderstand R über dem Magnetfeld aufgetragen ist. Wie der Abbildung 6.3 zu entnehmen ist, bricht der Magne-

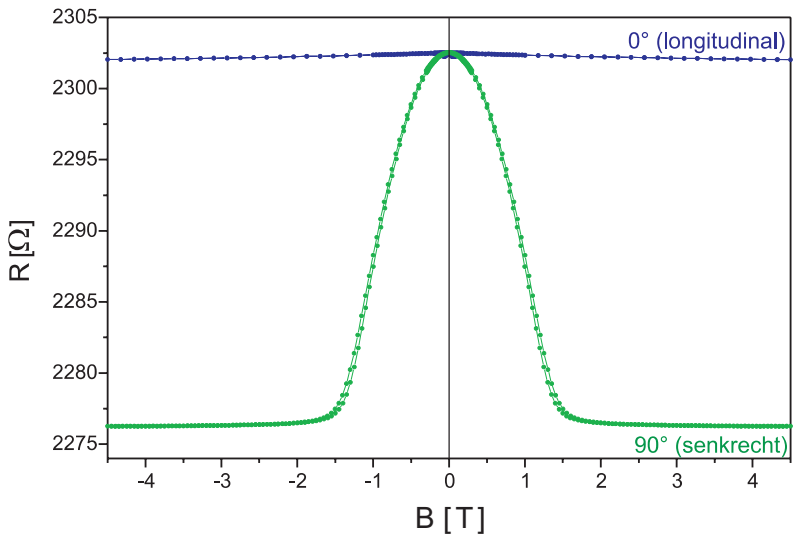


Abbildung 6.2: Dargestellt ist sowohl der longitudinale Magnetowiderstand $R(\alpha = 0°)$ als auch der senkrechte Magnetowiderstand $R(\alpha = 90°)$ einer 154nm breiten Co-Leiterbahn in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld. Im Bereich großer Magnetfelder ($B \approx 4.2$T) sättigt sowohl der longitudinale $R_s(\alpha = 0°)$ als auch der senkrechte $R_s(\alpha = 90°)$ Widerstand. Die Experimente wurden bei 4.2 K durchgeführt. [106, 114]

towiderstand bei bestimmten Feldstärken ein. Die Minima der Hysteresekurve entsprechen den Koerzitivfeldern B_c [104]. Die Messung des Magnetowiderstands kann also dazu genutzt werden, die Koerzitivfelder zu bestimmen. Nun wird diese Hysteresekurve des Magnetowiderstands mit der Kurve für eine breitere Leiterbahn verglichen. In der Abbildung 6.4 ist die Hysteresekurve einer 1 μm breiten Leiterbahn dargestellt. Im Fall der schmaleren Co-Leiterbahn besitzt die Kurve im Minimum ein Plateau, während sie bei der breiteren Leiterbahn einen Peak am Minimum besitzt. Das beobachtete Plateau wird in [116] mit einen Pinning von Domänenwänden erklärt. Ein Maß für die Stärke des Einbruchs wird über die relative Magnetowiderstandsänderung R_{rel} bezogen auf den Sättigungswert $R_s(\alpha = 0°)$ an der Stelle der Minima,

$$R_{rel} = \frac{R(B_c, \alpha = 0°) - R_s(\alpha = 0°)}{R_s(\alpha = 0°)}, \tag{6.2}$$

gegeben. R_{rel} variiert von 0.01% ($w = 154$nm) bis hin zu 0.13% ($w = 1\mu$m).

Über das Verhältnis $\Delta R_{rel}/\Delta R_s$ kann nun abgeschätzt werden, wie hoch der Anteil an Domänen, deren Magnetisierungsrichtung **M** senkrecht zur Stromrichtung **I** steht, in einer Co-Leiterbahn ist. Diese Abschätzung gilt nur unter der Annahme, daß die beobachtete Widerstandsabnahme ausschließlich auf dem anisotropen Magnetowiderstand beruht. Domänenwandbeiträge werden hierbei nicht berücksichtigt. In einer 529nm breiten Leiterbahn beträgt dieser Anteil

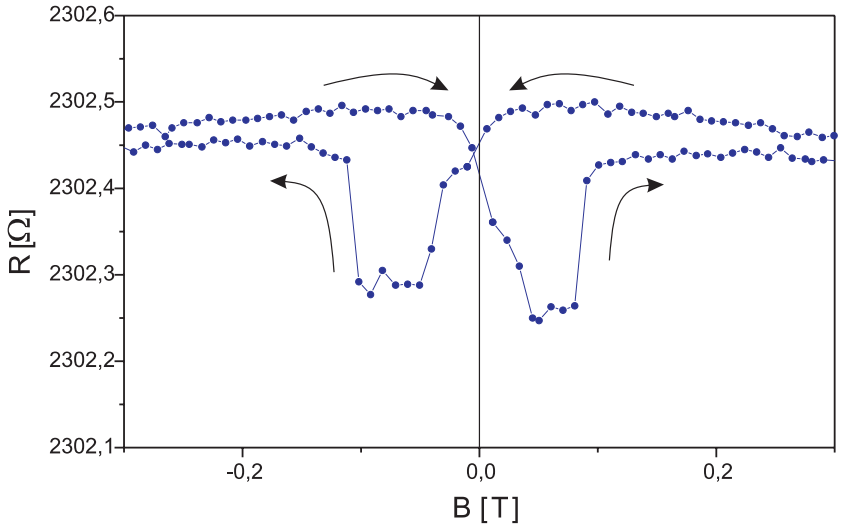


Abbildung 6.3: Longitudinaler Magnetowiderstand R einer 154nm breiten Co-Leiterbahn in Abhängigkeit vom angelegten Magnetfeld B bei einer Temperatur von 4.2K. Die Pfeile repräsentieren die Richtung der Messung. [106, 114]

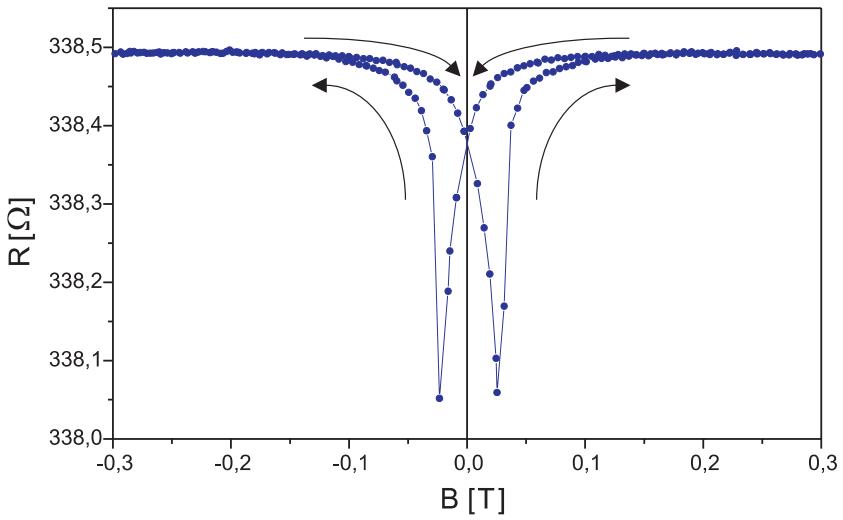


Abbildung 6.4: Longitudinaler Magnetowiderstand R einer 1μm breiten Co-Leiterbahn in Abhängigkeit vom angelegten Magnetfeld B bei einer Temperatur von 4.2K. Die Pfeile repräsentieren wiederum die Richtung der Messung. [106, 114]

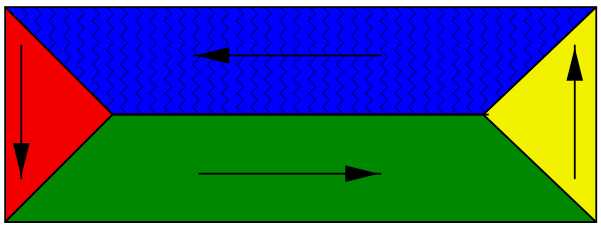


Abbildung 6.5: Darstellung einer Landau-Domäne, die zwei Hauptdomänen (blau und grün) und zwei Abschlußdomänen (rot und gelb) besitzt.

der Domänen bezogen auf die gesamte Leiterbahn beispielsweise 4%. Dies ist ein Hinweis darauf, daß der Ummagnetisierungsprozeß auf einem Nukleationsprozeß und nicht, wie in vielen Arbeiten diskutiert [104] wird, auf kohärenter Rotation beruht. Um einen Eindruck davon zu gewinnen, welcher Mode nun tatsächlich während des Ummagnetisierungsprozeß in Co-Leiterbahnen auftritt, werden diese Prozesse numerisch näher untersucht.

6.2 Remanente Domänenzustände in Dünnschichtelementen

Typische remanente magnetische Strukturen, die sich in Dünnschichtelementen ausbilden, werden für die spätere Diskussion der Simulationsergebnisse benötigt, speziell für die Interpretation der auftretenden Ummagnetisierungsmoden.

In Dünnschichtelementen ordnen sich die Domänen so an, daß die Summe aus Domänenwandenergie und Dipol-Dipol-Wechselwirkungsenergie minimiert wird. Dies gilt für den Fall, daß keine Anisotropie und kein äußeres Magnetfeld berücksichtigt werden. Die einfachste Anordnung magnetischer Domänen, die in einer quaderförmigen Struktur die Energie entsprechend minimiert, ist in Abbildung 6.5 dargestellt. Sie wurde 1935 von Landau [6] als erstes realistisches Modell einer Domänenstruktur vorhergesagt und wird experimentell in homogenen, weichmagnetischen Materialien beobachtet [124]. Diese sogenannte Landau-Struktur besteht aus vier Domänen, wobei die beiden größeren Domänen (Hauptdomänen) durch eine 180°-Wand voneinander getrennt sind. An die Enden dieser Domänen grenzen Abschlußdomänen, die durch 90°-Wände von den Hauptdomänen getrennt sind. Der magnetische Fluß in dieser Struktur ist geschlossen, wenn von den Details der Ecken, Kanten und der Domänenwände abgesehen wird. Hierbei handelt es sich also um einen entmagnetisierten Zustand.

In schmalen Dünnschichtelementen treten Varianten dieser Landau-Domänenstrukturen auf, die in Abbildung 6.6 dargestellt sind. Hierzu gehört

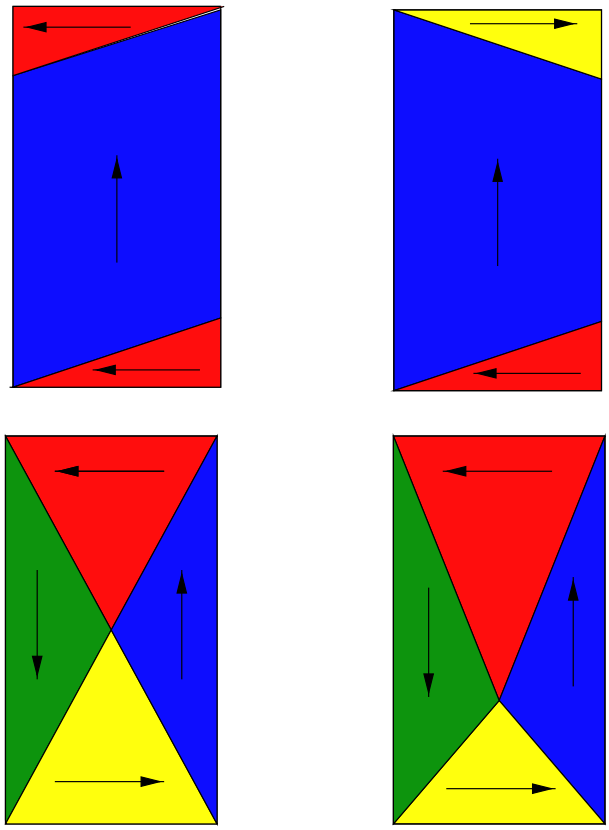


Abbildung 6.6: Darstellung des remanenten S-Zustandes (oben links), des C-Zustandes (oben rechts), sowie einer symmetrischen (unten links) und einer asymmetrischen Landau-Domänenstruktur (unten rechts).

zum einen die symmetrische sowie zum anderen die asymmetrische Landau-Struktur. Die symmetrische Landau-Struktur stellt eine Entartung der Landau-Struktur da: die mittlere 180°-Wand ist in dieser magnetischen Struktur nicht existent. Es sind vielmehr vier Bereiche entstanden, die sich in einem Punkt (dem Vortex) berühren und jeweils durch 90°-Wände voneinander getrennt werden. Aufgrund eines äußeren Magnetfeldes kann sich der Vortex verschieben, so daß eine asymmetrische Landau-Struktur entsteht.

Diese entarteten Landau-Zustände wurden mit Hilfe von mikromagnetischen Simulationen [88] gefunden. Ein bekanntes Beispiel zur Berechnung von Dünnschichtelementen ist das μMAG-Standard-Problem Nr. 1 [125, 126]. Für dieses Problem wurden verschiedene magnetische Strukturen gefunden, die ähnliche Energien besitzen. Es ist aber bislang nicht geklärt, bei welchem dieser Zustände es sich um den Grundzustand des Systems handelt. Welcher der remanenten Zustände realisiert wird, hängt von der magnetischen Vorgeschichte

des betrachteten Systems ab, aber auch von der Geometrie und dem Material der Probe.

In kleineren Dünnschichtelementen können beispielsweise der sogenannte C- sowie der S-Zustand entstehen, die ebenfalls in Abbildung 6.6 skizziert sind. Diese Zustände sind dadurch gekennzeichnet, daß Enddomänen auftreten, da sich die magnetischen Momente längs der Kanten anordnen. Durch diese Art der Anordnung wird die Oberflächenladung minimiert. Dadurch ändert sich die Magnetisierungsrichtung beim Übergang von der Mitte der Probe zu den Abschlußbereichen um 90°. Im Fall des S-Zustandes ist die Magnetisierungsrichtung in den gegenüberliegenden Enddomänen parallel. Ist die Magnetisierungsrichtung in den gegenüberliegenden Enddomänen antiparallel, so wird von einem C-Zustand gesprochen. In einem äußeren Feld begünstigen Enddomänen den Ummagnetisierungsvorgang, da sie als Keim für die Ausbildung von anderen magnetischen Domänenstrukturen dienen. Das System verharrt zunächst solange in diesen C- oder S-Zuständen, bis aufgrund des angelegten Gegenfeldes neue Domänenstrukturen entstehen. Dünnschichtelemente, in denen solche Strukturen entstehen, sind für die magnetische Datenspeicherung geeignet, da es sich hierbei im Gegensatz zu den Landau-Strukturen nicht um entmagnetisierte Zustände handelt.

6.3 Modellierung der Co-Leiterbahn

Für die numerischen Untersuchungen der Ummagnetisierungsvorgänge in Co-Leiterbahnen wird das Monte-Carlo-Verfahren (siehe Kapitel 3.3) basierend auf einem mikromagnetischen Modell verwendet. In Abbildung 6.7 ist skizziert, wie eine Co-Leiterbahn für die Monte Carlo-Simulation modelliert wird. Die Bahn wird in Zellen unterteilt, die eine Kantenlänge $a = 10$nm besitzen, wobei die Länge $L = 2560$nm und die Dicke $D = 40$nm beträgt. Die Breite W des Systems wird in Anlehnung an die Experimente variiert. Während die Dicke und Breite der simulierten Systeme den experimentellen Daten entsprechen, ist die Länge in den Simulationen viel geringer. Dies hängt damit zusammen, daß es im Moment aufgrund der beschränkten Speicherplatzkapazität nicht möglich ist, die realistische Länge der experimentell untersuchten Co-Leiterbahnen zu simulieren.

Die für die Simulationen gewählte Zellengröße ist in der Größenordnung der in den experimentell untersuchten Proben auftretenden Korngröße ($\approx$ 7nm). Die in den Körnern vorhandene Anisotropie, die durch die polykristalline Struktur verursacht wird, wird in den Simulationen zunächst nicht berücksichtigt, da sie in erster Näherung aufgrund der zufälligen Verteilung der leichten Achsen, vernachlässigt werden kann. Der Einfluß der polykristallinen Anisotropie auf den Ummagnetisierungsprozeß wird später in Kapitel 6.5.2 nochmals genauer

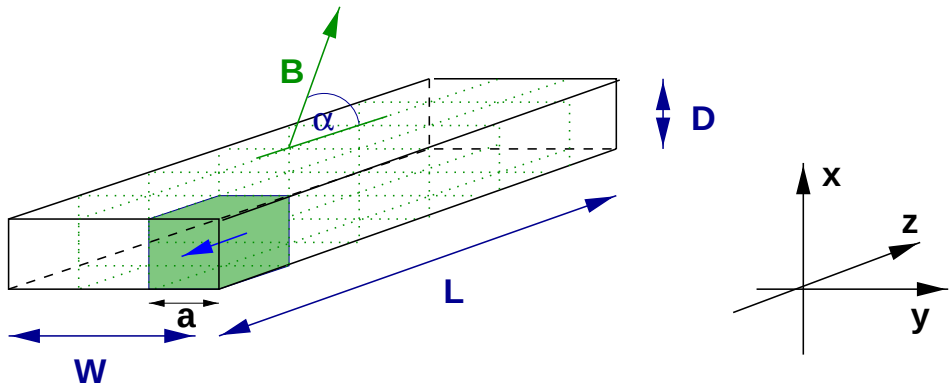


Abbildung 6.7: Skizze einer Leiterbahn der Länge L, der Breite W und der Dicke D, die in Zellen mit dem Volumen a^3 unterteilt ist. In jeder Zelle befindet sich ein magnetisches Moment μ. Das äußere angelegte Magnetfeld $\mathbf{B}$ kann um den Winkel α zu Probe gekippt werden.

diskutiert werden.

Die zugehörige Energie ist unter dieser Annahme

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mu_s \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i - w \sum_{i<j} \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_{i,j})(\mathbf{e}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{i,j}^3}.$$

Wie schon in Kapitel 2.1 diskutiert, sind die Transformationen auf die Materialparameter, die gewöhnlich in den Kontinuumsmodellen verwendet werden, gegeben durch $J = 2aA_x$ und $\mu_s = M_s a^3$. Die entsprechenden Werte der Materialparameter für Co sind in Tabelle 2.2 aufgeführt.

Um eine realistischere Beschreibung der Leiterbahnen zu erhalten, werden Systeme simuliert, die an den Rändern aufgerauht sind. In Kapitel 6.4.1 wird diskutiert, inwieweit diese Rauhigkeit einen Einfluß auf die auftretenden Ummagnetisierungsmechanismen hat. Neben der Rauhigkeit wird später noch der Einfluß der Enden (siehe Kapitel 6.5.1) sowie der polykristallinen Anisotropie (siehe Kapitel 6.5.2) untersucht.

Zu Beginn aller Simulationen sind alle magnetischen Momente parallel zueinander in z-Richtung des Systems ausgerichtet. In den Experimenten entspricht dies der Stromrichtung $\mathbf{I}$. Das äußere Magnetfeld $\mathbf{B}$ wird im folgenden stets in z-Richtung angelegt[1], das heißt also $\alpha = 180°$. Das Feld ist entgegengesetzt zu den magnetischen Momenten orientiert. Ausgehend von dieser Ausgangssituation wird die Stärke des Magnetfeldes variiert, so daß im Verlauf der Simulationen eine Hysteresekurve durchlaufen wird.

[1] Bis auf die Simulationen, in denen die Winkelabhängigkeit untersucht wird.

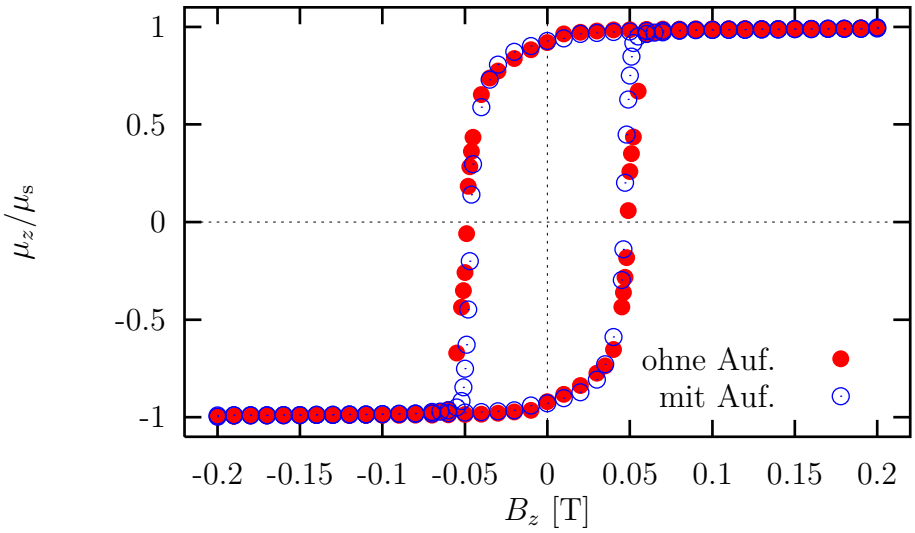


Abbildung 6.8: z-Komponente der Magnetisierung über dem Magnetfeld B_z für ein System der Breite 320nm mit (○) und ohne Aufrauhung (●).

6.4 Simulationsergebnisse

6.4.1 Die Grenzfälle schmaler und breiter Leiterbahnen

In diesem Abschnitt wird zunächst das Ummagnetisierungsverhalten im Grenzfall breiter Systeme numerisch untersucht. Hierzu wird ein System mit einer Breite von 320nm herangezogen. In der Abbildung 6.8 ist die simulierte Hysteresekurve und in Abbildung 6.9 sind die zugehörigen Momentaufnahmen des Systems bei verschiedenen Magnetfeldstärken dargestellt.

Die linke Aufnahme zeigt den remanenten Zustand des Systems (B_z = 0T). Die Magnetisierung liegt stets in der Ebene. Es ist zu erkennen, daß der Ummagnetisierungsprozeß an den Systemenden einsetzt, wo sich asymmetrische Landau-Domänen (siehe Abbildung 6.9) ausgebildet haben. Diese Domänenstrukturen sind aus einem S-Zustand entstanden (vgl. Abbildung 6.6). Durch die Vergrößerung des angelegten Gegenfelds entsteht eine komplizierte Domänenstruktur. Innerhalb des Systems bilden sich mehrere Domänen aus, die in der Ebene senkrecht zueinander stehen. Es entstehen sowohl 180°- als auch 90°-Domänenwände. Der Aufbau der einzelnen Domänenwände ist anhand der Momentaufnahmen deutlich zu erkennen. Die mittlere Aufnahme zeigt die Domänenstruktur, bei der das angelegte Magnetfeld dem Koerzitivfeld entspricht ($B_c = 0.046$T).

Um eine realistischere Beschreibung der Co-Leiterbahnen in den Simulationen zu erhalten, werden die Ränder der simulierten Systeme aufgerauht. Im folgenden wird untersucht, welche Auswirkungen diese Aufrauhung auf den Ummagne-

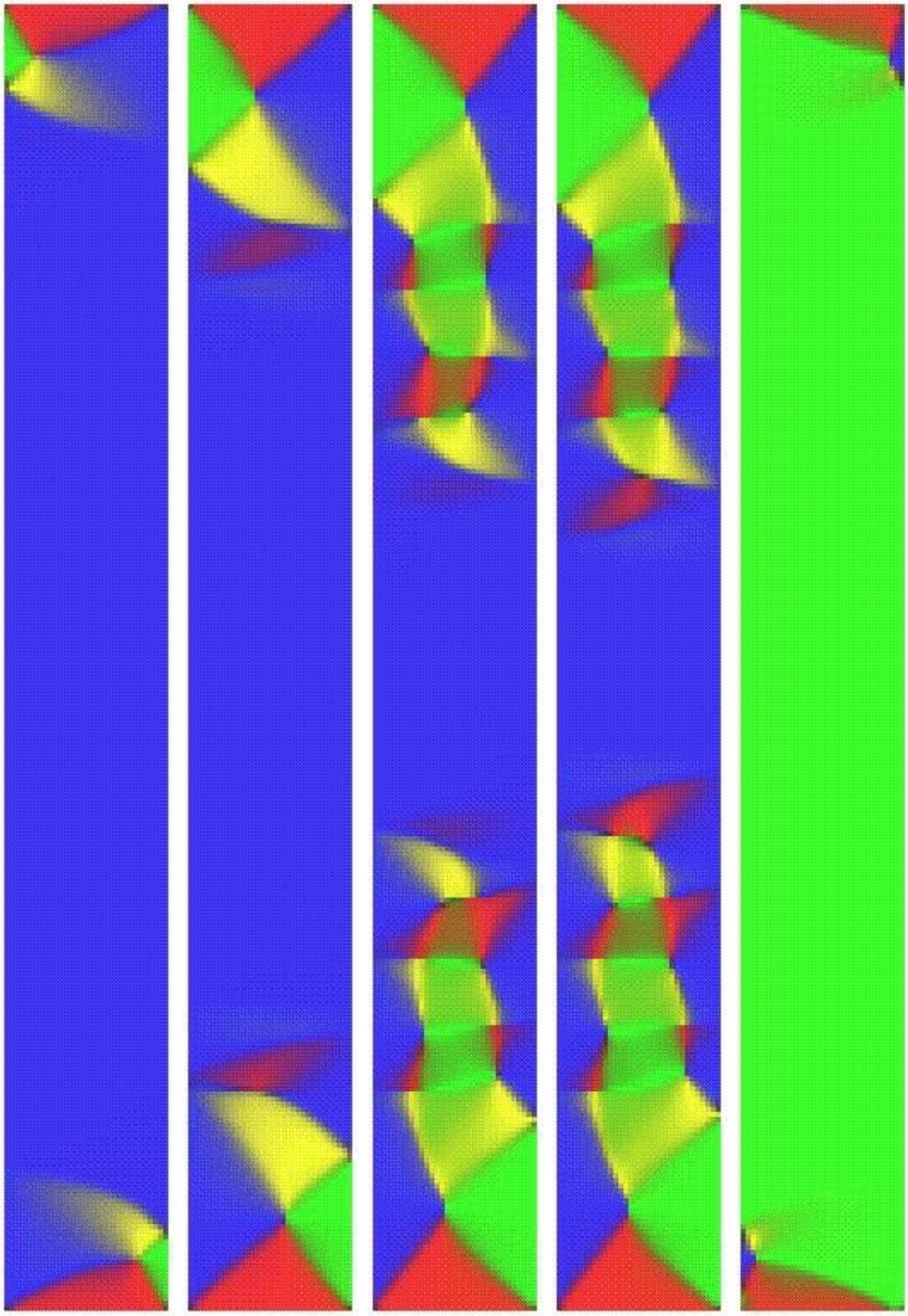


Abbildung 6.9: Momentaufnahme eines Systems ohne Aufrauhung der Breite 320nm während der Hysterese aus Abbildung 6.8 (Reduzierung des Feldes von links nach rechts: $B_z = 0.0\text{T}$, -0.035T, -0.046T, -0.047T und -0.06T). Die Farbkodierung entspricht dem in Abbildung 4.3 dargestellten Farbkreis.

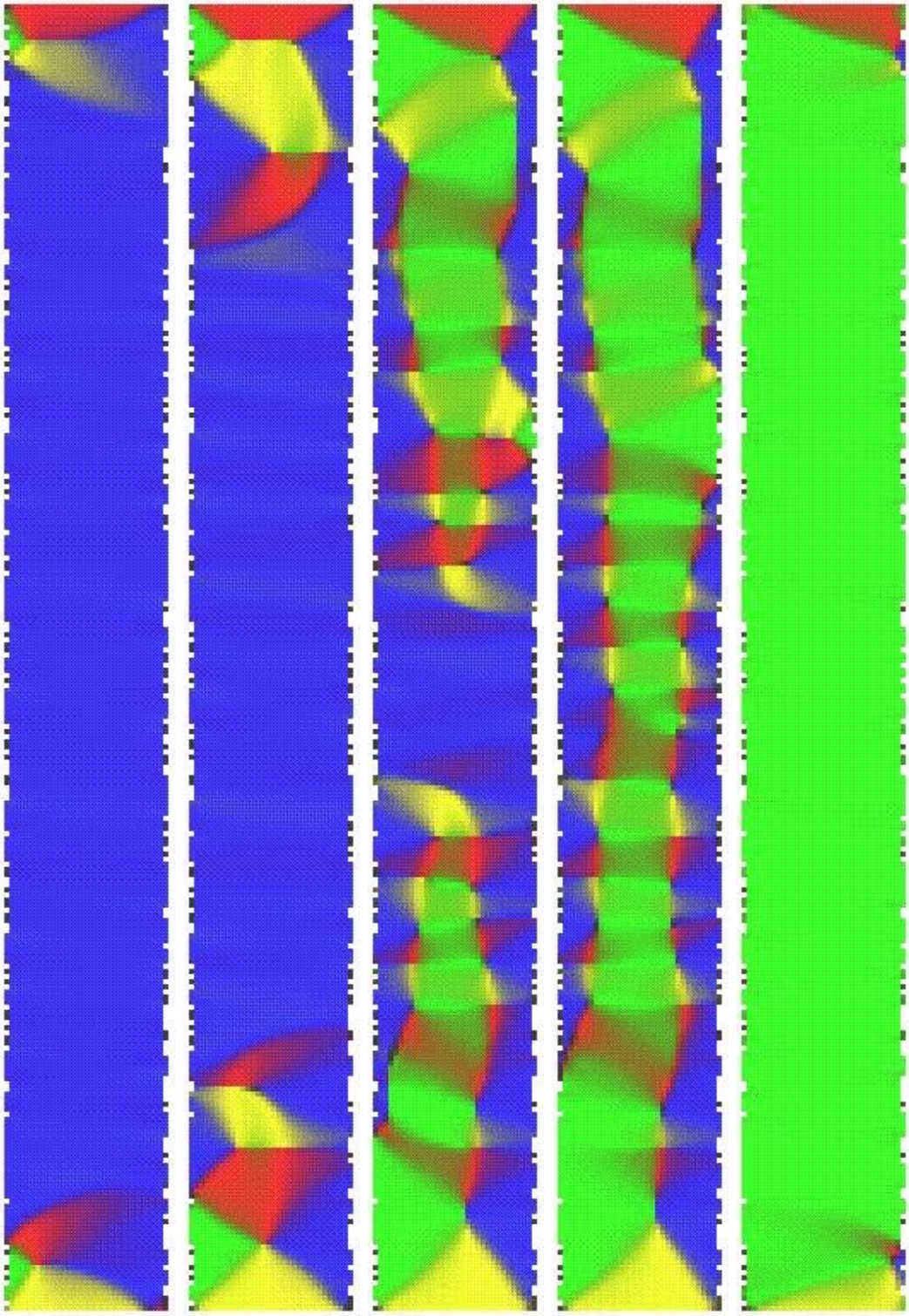


Abbildung 6.10: Momentaufnahme eines Leiterbahn mit einer Breite von 320nm während der Hysterese aus Abbildung 6.8 (von links nach rechts: $B_z = 0\text{T}$, -0.035T, -0.046T, -0.047T und -0.06T). Die Farbkodierung entspricht dem in Abbildung 4.3 dargestellten Farbkreis.

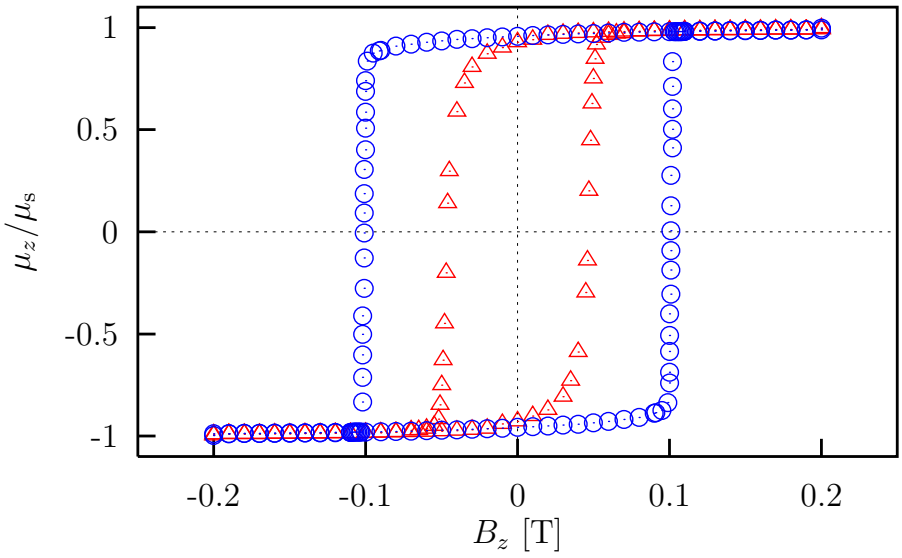


Abbildung 6.11: z-Komponente der Magnetisierung über dem Magnetfeld B_z für zwei Leiterbahnbreiten 80nm (○) und 320nm (△). Die Daten stammen aus Monte-Carlo-Simulation für $T = 4$K.

tisierungsprozeß hat. In der Abbildung 6.8 sind die simulierten Hysteresekurven für ein System der mit und ohne Aufrauhung dargestellt. Die für die Simulationen des aufgerauhten Systems verwendeten Parameter entsprechen denen des in Abbildung 6.9 dargestellten Systems ohne Aufrauhung. Anhand dieses Vergleichs ist zu erkennen, daß sich die Hysteresekurven und damit auch die Koerzitivfelder leicht voneinander unterscheiden. Die z-Komponente der magnetischen Momente der Leiterbahn mit Aufrauhung fällt langsamer auf den Sättigungswert ab als im Fall der Leiterbahn ohne Aufrauhung. Dies ist ein Hinweis darauf, daß die Domänenwände an der Aufrauhung gepinnt werden.

Ein Vergleich der Momentaufnahmen des Systems mit (Abbildung 6.10) und ohne Aufrauhung (Abbildung 6.9) zeigt, daß sich der Ummagnetisierungsmode nicht wesentlich ändert. Anhand der Momentaufnahme des remanenten Zustands ist zu erkennen, daß sich in diesem System die Landau-Strukturen — offensichtlich zufällig — aus einem C-Zustand herausgebildet haben. Die Landau-Strukturen sind hier also parallel zueinander angeordnet. Dieser Effekt hat allerdings keinen Einfluß auf die auftretenden Ummagnetisierungsmode. Für die nachfolgenden Simulationen werden nun aufgerauhte Systeme untersucht, da sie die realistischere Beschreibung der experimentellen Leiterbahnen darstellen.

Zur folgenden Untersuchung des Ummagnetisierungsprozesses in schmalen Systemen wird eine System mit einer Breite von 80nm gewählt. Die Bilderserie in Abbildung 6.12 zeigt den entsprechenden Ummagnetisierungsprozeß und in Abbildung 6.11 ist die zu den Momentaufnahmen zugehörige Hysteresekurve

dargestellt. Der Ummagnetisierungsmechanismus unterscheidet sich stark von dem vorher beobachteten Mechanismus in breiten Systemen. Ausgehend von den Systemenden bilden sich zwei Domänenwände aus, die während des Ummagnetisierungsprozesses durch das System laufen. Diese Wände besitzen ebenfalls eine Landaustruktur.

Anhand des Vergleichs der Hystereskurven des breiten mit dem schmalen System, der in Abbildung 6.11 dargestellt ist, ist ebenfalls zu erkennen, daß sich die Ummagnetisierungsmechanismen erheblich voneinander unterscheiden. Im Fall des schmalen Systems ist zu erkennen, daß es sich um eine Rechteckhysterese handelt. Bei Erhöhung des Gegenfelds bleibt der Wert der Magnetisierung zunächst konstant. In der Nähe des Koerzitivfelds magnetisiert die Struktur dann abrupt um. Das heißt, daß das System, nachdem sich die Domänenwände abgelöst haben, sofort ummagnetisiert wird. Im Fall des breiten Systems ändert sich der Wert der Magnetisierung langsam, da sich zunächst einzelne Domänenwände aufbauen. Der Aufbau dieser Domänen dauert solange an bis das System vollständig ummagnetisiert wird. Das Koerzitivfeld (B_c = -0.046 T) dieses Systems ist viel geringer als im Fall des schmalen (B_c = -0.102 T). Die Breitenabhängigkeit der Koerzitivfelder wird im späteren Verlauf dieses Kapitels noch ausführlich diskutiert werden.

Der Übergang zwischen den beiden beschriebenen Mechanismen findet ungefähr bei einer Systembreite von 100nm statt. Dieser Wert ist nur ein wenig niedriger als die Breite der experimentell untersuchten Co-Leiterbahnen, so daß die hier gezeigte komplizierte Domänenstruktur relevant ist für die Interpretation der zuvor vorgestellten Magnetowiderstandsmessungen.

Für den anisotropen Magnetowiderstand ist der Anteil der magnetischen Momente bedeutend, der senkrecht zur Stromrichtung ausgerichtet ist. Deshalb wird zusätzlich zur longitudinalen Magnetisierung μ_z noch das Verhalten der senkrechten Magnetisierung $\mu_\perp$,

$$\mu_\perp = -\langle\overline{\sqrt{S_x^2 + S_y^2}}\rangle, \tag{6.3}$$

untersucht, welche in direktem Zusammenhang mit dem anisotropen Widerstand steht. Sowohl $\mu_\perp$ als auch μ_z zeigen einen Hystereseeffekt wie aus der Abbildung 6.13 hervorgeht, in der beide Größen dargestellt sind. Der Peak der senkrechten Magnetisierung $\mu_\perp$ fällt eindeutig mit dem Koerzitivfeld zusammen. Der Wert der Spitze beträgt 48% vom Sättigungswert. Dieser Wert ist viel höher als der in den Experimenten an einer 529nm breiten Leiterbahn beobachtete Wert, der 4% des Sättigungswertes beträgt [106]. Diese Abweichung rührt vermutlich daher, daß die experimentell untersuchten Co-Leiterbahnen 20 mal länger sind als die simulierten, so daß die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die gesamte Leiterbahn zur gleichen Zeit vollständig ummagnetisiert wird, gering ist. Das heißt, daß vermutlich nur Teilvolumen der Leiterbahnen ummagnetisiert werden, während andere Bereiche der Leiterbahnen in ihre ursprüngliche

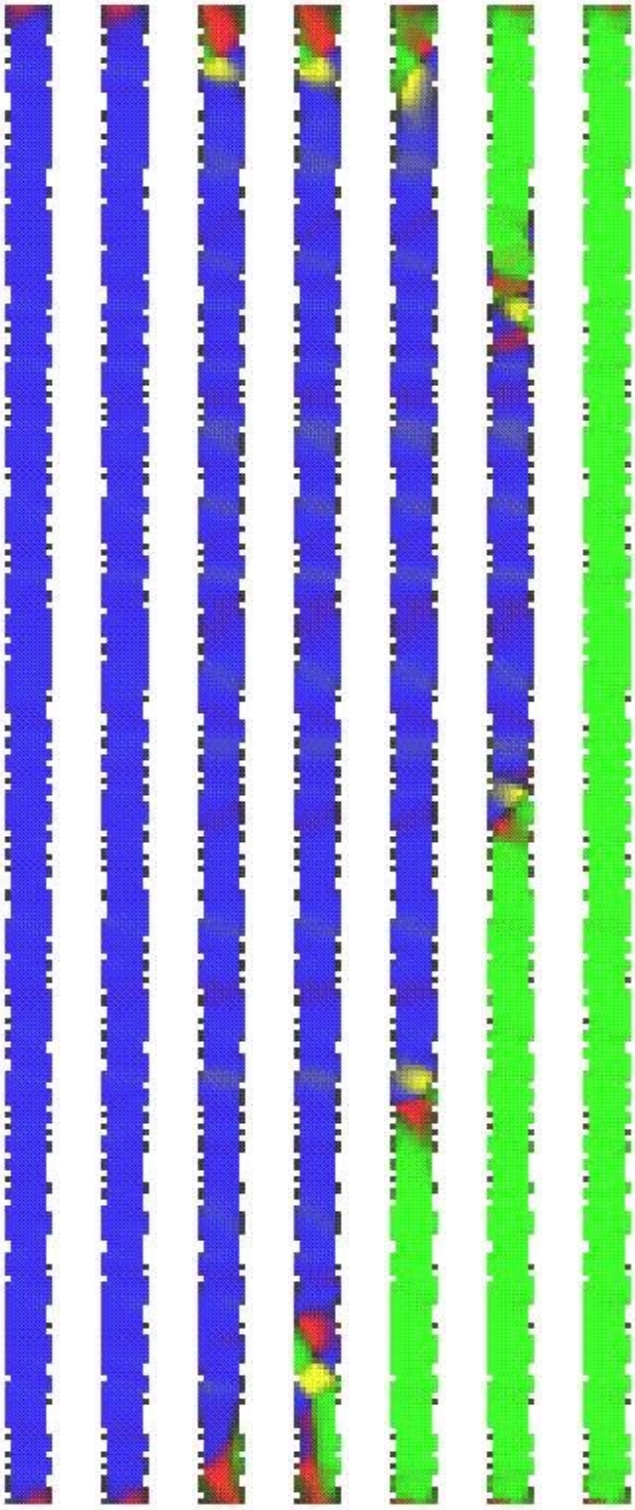


Abbildung 6.12: Momentaufnahme eines Systems mit einer Breite von 80nm während der Hysterese aus Abbildung 6.11 (Reduzierung des Felds von links nach rechts: $B_z = 0.05$T, 0.0T, -0.099T, -0.1T, -0.101T, -0.102T und $-0.106T$). Die Farbkodierung ist in Abbildung 4.3 näher beschrieben.

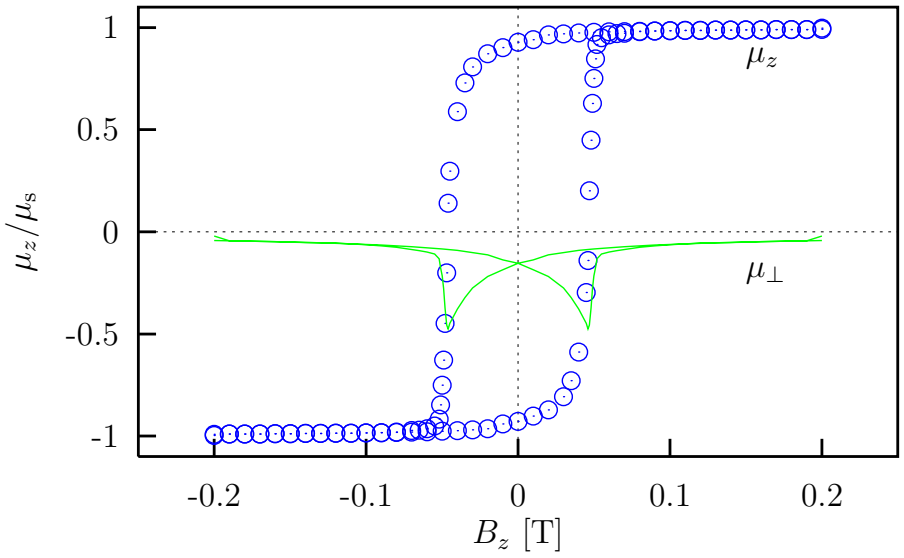


Abbildung 6.13: Hysteresekurve eines Systems der Breite 320nm, wobei μ_z die longitudinale und $\mu_\perp$ die senkrechte Magnetisierung ist. Die letztere Größe ist ein Maß für den anisotropen Magnetowiderstand

Richtung weisen. Dieses Verhalten während des Ummagnetisierungsvorgangs ist ebenfalls eine mögliche Erklärung für den in den Experimenten gefundenen Effekt, daß der Magnetowiderstand im Fall schmaler Leiterbahnbreiten ein Plateau besitzt. Das auftreten dieses Plateaus konnte in den Monte-Carlo-Simulationen nicht gefunden werden.

Das Verhalten der senkrechten Magnetisierung $\mu_\perp$ entspricht ansonsten dem des gemessenen Magnetowiderstands (vgl. zum Beispiel Abbildung 6.3), so daß mit der numerischen Meßgröße eine Interpretation im Sinne des anisotropen Magnetowiderstands möglich ist. Allerdings können zusätzliche Effekte nicht berücksichtigt werden wie beispielsweise die Änderung des Magnetowiderstands aufgrund der Domänenwänden, die sich in den Leiterbahnen während des Ummagnetisierungsprozesses aufbauen.

6.4.2 Breiten- und Winkelabhängigkeit der Koerzitivfelder

Experimentell wurde mit Hilfe der Messung des Magnetowiderstands sowohl die Breitenabhängigkeit als auch die Winkelabhängigkeit der Koerzitivfelder untersucht. Im folgenden sollen diese Abhängigkeiten ebenfalls numerisch untersucht werden.

Die Abhängigkeit der Koerzitivfelder von der Leiterbahnbreite wird nun diskutiert. Hierzu werden die experimentell gewonnenen Ergebnisse mit den numerischen Resultaten verglichen. Dieser Vergleich ist in der Abbildung 6.14 dargestellt. Die experimentell und numerisch bestimmten Koerzitivfelder sind

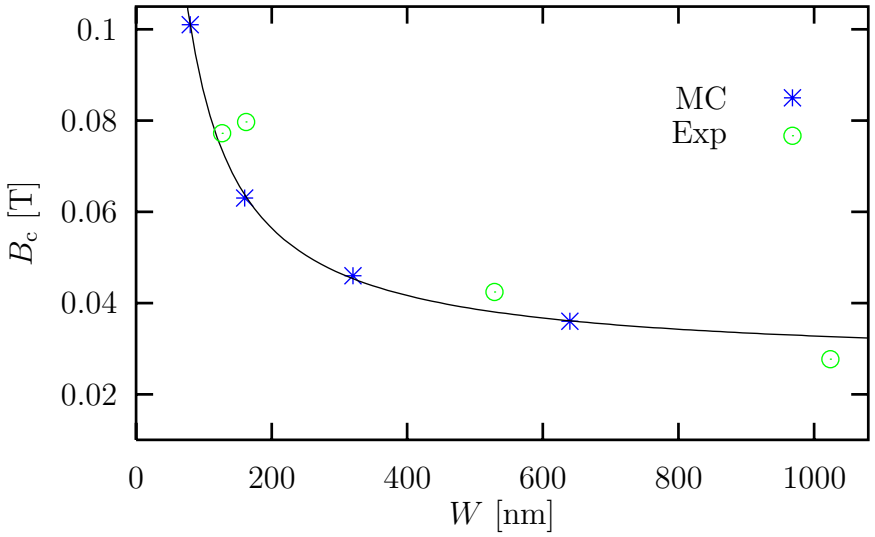


Abbildung 6.14: Koerzitivfeldstärke B_c über der Schichtbreite W. Die Daten stammen aus Monte-Carlo-Simulationen sowie aus experimentellen Untersuchungen [114]. Die durchgezogenen Linie wurde mittels Gleichung 6.4 an die Datenpunkte angepaßt.

von der gleichen Größenordnung. Weiterhin ist anhand der Abbildung 6.14 zu erkennen, daß mit zunehmender Breite die Werte der Koerzitivfelder abnehmen.

Das Koerzitivfeld einer Leiterbahn kann unter der Annahme bestimmt werden, daß die magnetischen Momente in der Leiterbahn kohärent rotieren. In diesem Fall ergibt sich für das Koerzitivfeld

$$B_c = B_1 + B_2 \frac{D}{W} \tag{6.4}$$

mit $B_2 = \mu_0 M_s$ [127]. Unter der Verwendung der Literaturwerte von Co (vgl. Tabelle 2.2) hat dieser Vorfaktor einen Wert von $B_2^{\text{Lit}} = 1.8\text{T}$. Die durchgezogene Linie in Abbildung 6.14 entspricht der Gleichung 6.4, wobei B_1 und B_2 als Fitparameter gedient haben. Sie wurden zu $B_1 = 0.03\text{T}$ und $B_2 = 0.15\text{T}$ bestimmt. Die Abweichung von B_2^{Lit} beträgt ungefähr 90% und läßt sich damit erklären, daß die Leiterbahn nicht mittels kohärenter Rotation ummagnetisiert, sondern — wie vorher anhand der Momentaufnahmen gezeigt wurde — mit Hilfe von komplizierten Domänenstrukturen. Erstaunlich hierbei ist allerdings, daß diese analytisch ermittelte Breitenabhängigkeit des Koerzitivfeldes qualitativ sowohl mit dem numerisch als auch experimentell gefundenen Verhalten übereinstimmt, obwohl ein anderer Ummagnetisierungsmode als kohärente Rotation numerisch gefunden wurde. Dies liegt vermutlich daran, daß der zweite Summand in Gleichung 6.4 den Einfluß der Breitenabhängigkeit des Streufeldes beschreibt. Das Streufeld wiederum kann auch für andere Ummagnetisierungsmoden relevant sein, führt hier allerdings offensichtlich zu einem anderen Faktor B_2.

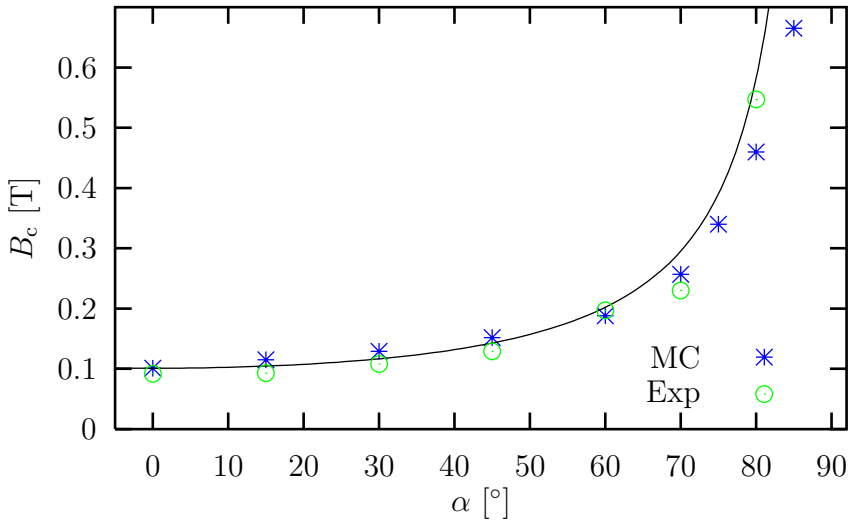


Abbildung 6.15: Koerzitivfeldstärke B_c ist über dem Winkel α aufgetragen. Die Daten stammen aus Monte-Carlo-Simulationen und aus experimentellen Untersuchungen [114]. Die durchgezogene Linie entspricht Gleichung 6.5.

Im folgenden wird die Abhängigkeit der Koerzitivfelder vom Winkel α zwischen dem angelegten Feld und der Probe (vgl. Skizze 6.7) diskutiert. In Abbildung 6.15 werden die Ergebnisse aus den experimentellen und numerischen Untersuchungen gegenübergestellt. Aus der Darstellung geht hervor, daß die Daten gut übereinstimmen. Die durchgezogene Linie ist gegeben durch

$$B_c = \frac{B_c(\alpha = 0)}{\cos(\alpha)}. \tag{6.5}$$

Hierbei ist das effektive Feld in der Schicht konstant. Nur dieses ist relevant, wenn angenommen wird, daß sich die magnetischen Momente ausschließlich in der yz-Ebene der Leiterbahn drehen und nicht aus der Schicht heraus. Das heißt, daß die x-Komponente dieses Felds irrelevant wird. Die Abweichungen sowohl der numerischen als auch der experimentellen Daten von dieser analytischen Formel für größere Winkel ($\alpha > 60°$) beruht darauf, daß sich die magnetischen Momente für hohe Felder doch aus der Filmebene heraus drehen können.

Anhand der Monte-Carlo-Simulationen ist es möglich, die während des Ummagnetisierungsprozesses in Leiterbahnen auftretenden Ummagnetisierungsmoden zu charakterisieren. Weiterhin konnten die Koerzitivfelder numerisch bestimmt und mit experimentellen Daten verglichen werden. Es hat sich gezeigt, daß die numerisch ermittelten Felder von der gleichen Größenordnung sind wie die experimentellen. Ebenso konnte die experimentell gefundene Breiten- und Winkelabhängigkeit der Felder numerisch bestätigt werden. Im nächsten Abschnitt wird diskutiert, welchen Einfluß die Berücksichtigung der polykristallinen Anisotropie sowie die Variation der Enden auf die in den Simulationen

beobachteten Ummagnetisierungsmoden haben, und inwieweit diese die ermittelten Koerzitivfelder verändern.

6.5 Diskussion weiterer Einflüsse auf die Ummagnetisierungsprozesse

Es ist schwierig die Modellierung so zu gestalten, daß sie eine vollständige realistische Beschreibung der experimentell untersuchten Leiterbahnen ermöglicht. Für eine realistische Beschreibung müßten die Form der untersuchten Leiterbahnen exakt simuliert werden. Ebenfalls müßte die polykristalline Anisotropie berücksichtigt werden. In diesem Kapitel wird diskutiert, wo die Schwierigkeiten bei der Modellierung realistischer Systeme liegen. Weiterhin wird abgeschätzt, welchen Einfluß die Änderung der Form der Enden sowie die Berücksichtigung der polykristallinen Anisotropie auf die bisher beobachteten Ummagnetisierungsmoden haben.

6.5.1 Einfluß der Form der Enden

Es wird nun numerisch untersucht, inwieweit die Form der Enden der Leiterbahnen einen Einfluß auf den Ummagnetisierungsprozeß haben. Um einen Eindruck von diesem Einfluß zu bekommen, wurde ein System in Anlehnung an die im Experiment tatsächlich untersuchten Strukturen (Abbildung 6.1) modelliert. Die in den Simulationen untersuchte Struktur ist in Abbildung 6.16 dargestellt.

Aufgrund der energetisch günstigeren Formansiotropie der Endstücke und dem entsprechend kleineren Koerzitivfeld setzt der Ummagnetisierungsprozeß zunächst an den breiteren Endstücken des Systems ein. In den Endstücken bilden sich komplizierte Domänenstrukturen aus. Anhand der linken Momentaufnahme ist zu erkennen, daß im oberen Endstück eine Art Landaustruktur entstanden ist, während sich im unteren Teil eine kompliziertere Struktur ausgebildet hat. Ausgehend von diesen Strukturen beginnt erst später der Nukleationsprozeß im mittleren Teil des Systems. Es entstehen ebenfalls raumfüllende Domänenstrukturen wie zuvor in den simulierten Systemen ohne Berücksichtigung der Form der Endstücke (vgl. Abbildung 6.10 und 6.9). Diese raumfüllenden Strukturen, die in den beiden verschiedenen Systemen entstehen, unterscheiden sich nur leicht voneinander. In Abbildung 6.17 ist ein Vergleich der Hysteresekurven der beiden hier betrachteten Systeme dargestellt. Hierbei werden die z-Komponenten der magnetischen Momente miteinander verglichen. Für diesen Vergleich werden nur die magnetischen Momente des 320nm breiten mittleren Teils der simulierten Struktur und nicht die der gesamten simulierten Struktur miteinander verglichen. Das heißt also, daß die magnetischen Momente der Endstücke hierbei nicht berücksichtigt werden. Werden die beiden Hyste-

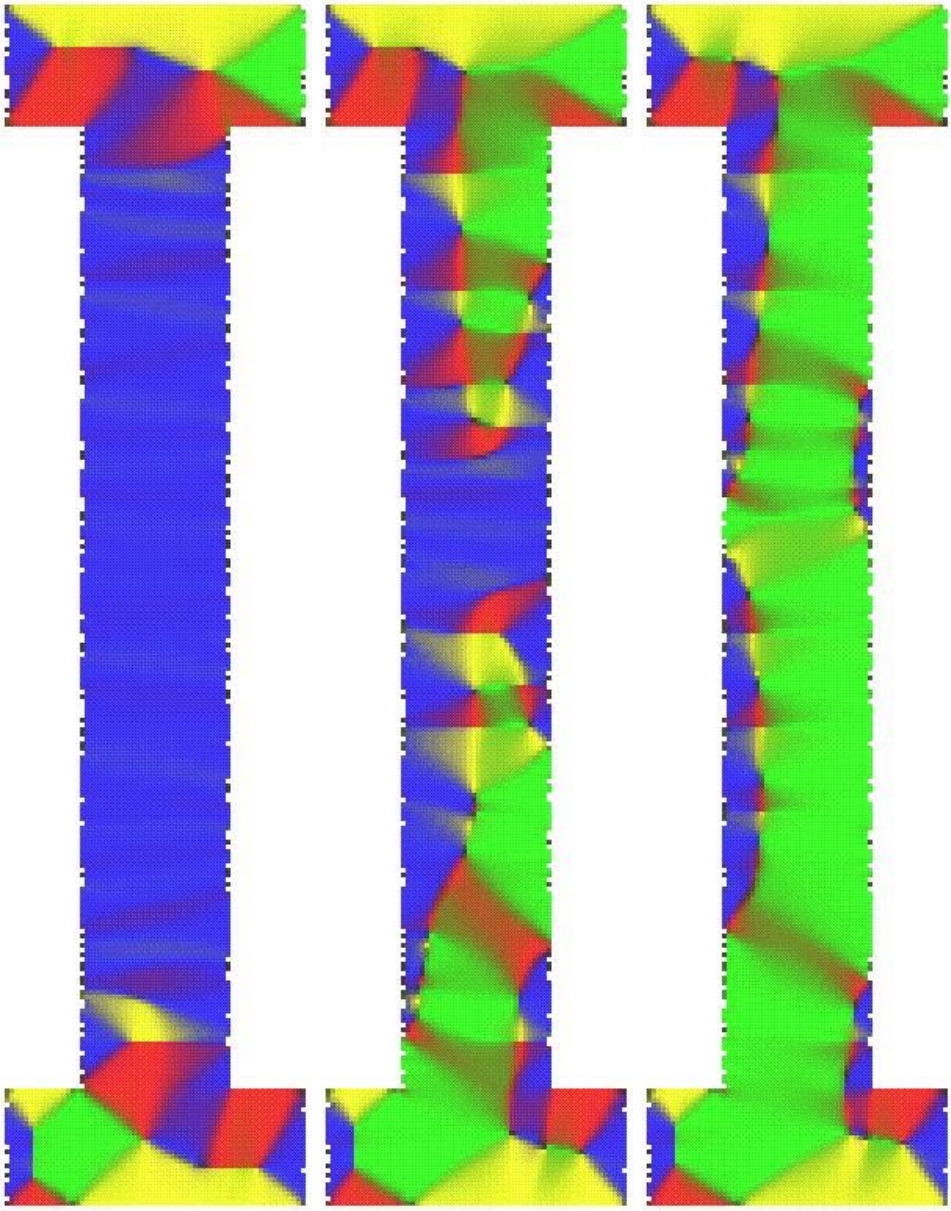


Abbildung 6.16: Momentaufnahme eines Systems mit einer Breite von 320nm, wobei die Endstücke eine Breite von 640nm besitzen, während der Hysterese in Abbildung 6.17 (Reduzierung des Felds von links nach rechts:-0.043T, -0.052T und -0.053T). Die Farbkodierung entspricht dem in Abbildung 4.3 dargestellten Farbkreis.

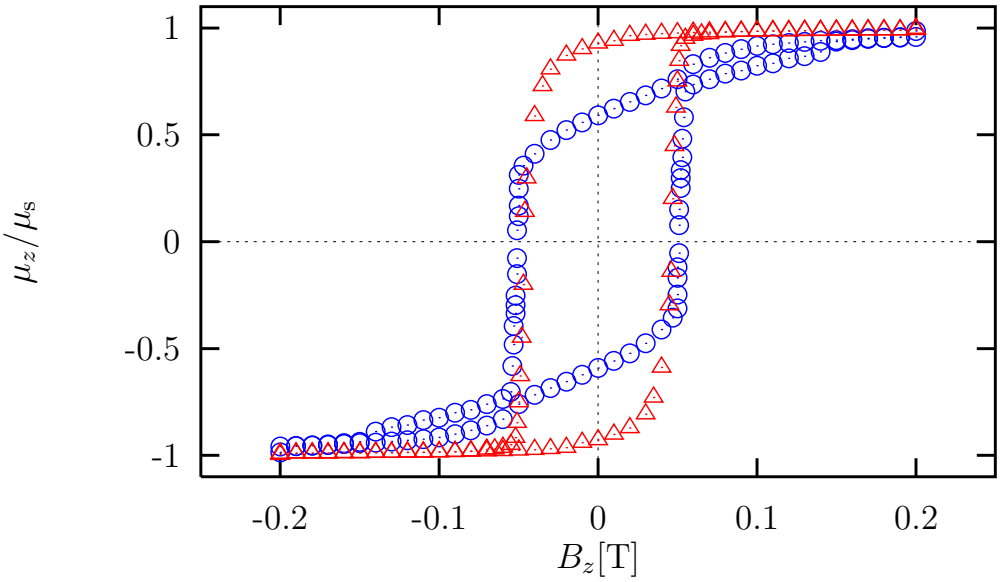


Abbildung 6.17: z-Komponente der Magnetisierung des Systems der Breite 320nm ohne Endstücke (△). Für das System mit Endstücken (○) ist nur die z-Komponente der Magnetisierung der Leiterbahn und nicht die der gesamten Struktur dargestellt.

resekurven miteinander verglichen, so ist zu erkennen, daß in dem System, das von der Form der Endstücke beeinflußt wird, der Ummagnetisierungsprozeß bei viel höheren Magnetfeldwerten einsetzt. Der Wert der Magnetisierung nimmt dann gleichmäßig ab, bis er plötzlich abrupt einbricht. Obwohl die Formen der Hysteresekurven unterschiedlich sind, unterscheiden sich die Koerzitivfelder und die Ummagnetisierungsmoden im inneren Teil nicht stark voneinander.

Eine systematische Untersuchung eines realistischeren Systems (Abbildung 6.1) ist ohne weiteres nicht möglich. Das Hauptproblem ist hierbei der hohe Speicherplatzbedarf. Der Grund für den großen Speicherplatzbedarf liegt darin, daß das umgebende System entsprechend der Breite der Endstücke vollständig mit simuliert wird, wobei die Umgebung der Leiterbahn mit Nullen aufgefüllt wird. Ein weiterer Punkt, der den Speicherplatzbedarf erhöht, ist die Berücksichtigung der Dipol-Dipol-Wechselwirkung in diesen Simulationen. Hierzu wird die Fast-Fourier-Transformations-Methode in Kombination mit der *zero padding*-Methode herangezogen. Da diese Methode eine Verdopplung des Systems in alle drei Raumrichtungen zur Folge hat, erhöht sich wiederum der Speicherplatz, der für die Simulationen benötigt wird (vgl. Kapitel 3.2). Diese beiden Punkte zusammengenommen ergeben einen hohen Speicherplatzbedarf, der für die hier vorgestellten Simulationen nicht zur Verfügung stand. Neben dem Speicherplatzproblem spielt ebenfalls die Rechenzeit eine Rolle, die für diese Art der Systeme beträchtlicht ist.

6.5.2 Einfluß der polykristallinen Anisotropie

Im folgenden wird diskutiert, inwieweit die bisher vernachlässigte polykristalline Anisotropie einen Einfluß auf die Ummagnetisierungsmoden und die Koerzitivfeldstärken hat. Bei diesen Simulationen wird die Diskretisierung zu 7nm gewählt, was der experimentell beobachteten mittleren Korngröße von Co entspricht. In der Simulation wird jeder Gitterzelle eine zufällige Anisotropie zugewiesen, die in der Ebene den Wert der kristallinen Anisotropie von Co aus Tabelle 2.2 annimmt. Es werden Leiterbahnen mit einer Dicke von 42nm und einer Länge von 3584nm bei einer Temperatur von 4K untersucht. Die Breite wird zu 84nm und 448nm angenommen. Die zugehörige Energie des Systems hat folgende Form

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - d_\mathrm{a} \sum_i (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{S}_i)^2 - \mu_s \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i - w \sum_{i<j} \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_{i,j})(\mathbf{e}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{i,j}^3},$$

wobei d_a der Wert der Zufallsanisotropie und $\mathbf{e}_i$ ein zufälliger Einheitsvektor in der Ebene ist. Zunächst wird die Ummagnetisierungsmode eines schmalen Systems untersucht. In der Abbildung 6.18 sind die entsprechenden Momentaufnahmen dargestellt. Anhand dieser Momentaufnahmen ist zu erkennen, daß sich die Ummagnetisierungsmode von den bisher beobachteten Moden in schmalen Systemen (vgl. Abbildung 6.12) dadurch unterscheidet, daß diesmal nur eine Domänenwand durch das System läuft, im Gegensatz zu den bisher beobachteten zwei Domänenwänden.

In Abbildung 6.19 ist die zu den Momentaufnahmen gehörende Hysteresekurve dargestellt. Zum Vergleich ist in dieser Abbildung ebenfalls die Hysterese des Systems der Breite 80nm eingezeichnet[2]. Das Koerzitivfeld wird durch die Anisotropie stark beeinflußt. Es ist nun größer als in den Betrachtungen ohne Anisotropie. Dieser Unterschied liegt darin begründet, daß in dem einen Fall zwei Domänenwände durch das System laufen (ohne Anisotropie) und in dem anderen Fall nur eine Domänenwand (mit Anisotropie).

In den Systemen, bei denen die polykristalline Anisotropie berücksichtigt wird, schwanken die Werte der ermittelten Koerzitivfelder erheblich. Aufgrund der zufälligen Verteilung der Anisotropie, können unterschiedliche Anisotropiefelder entstehen. Dies hat zur Folge, daß sich zufällig eine oder auch zwei Domänenwände ausbilden können, was wiederum unterschiedliche Koerzitivfelder zur Folge hat.

Nachdem der Einfluß der polykristallinen Anisotropien auf die Ummagnetisierungsmoden in schmalen Systemen untersucht wurde, wird jetzt ihr Einfluß in breiteren Systemen diskutiert. Hierzu wird ein System der Breite 448nm

[2]Dieses System besitzt eine andere Diskretisierung (10nm). Der Einfluß der Diskretisierung auf die Mechanismen wurde bisher noch nicht untersucht, und wird in dieser Arbeit deshalb nicht diskutiert.

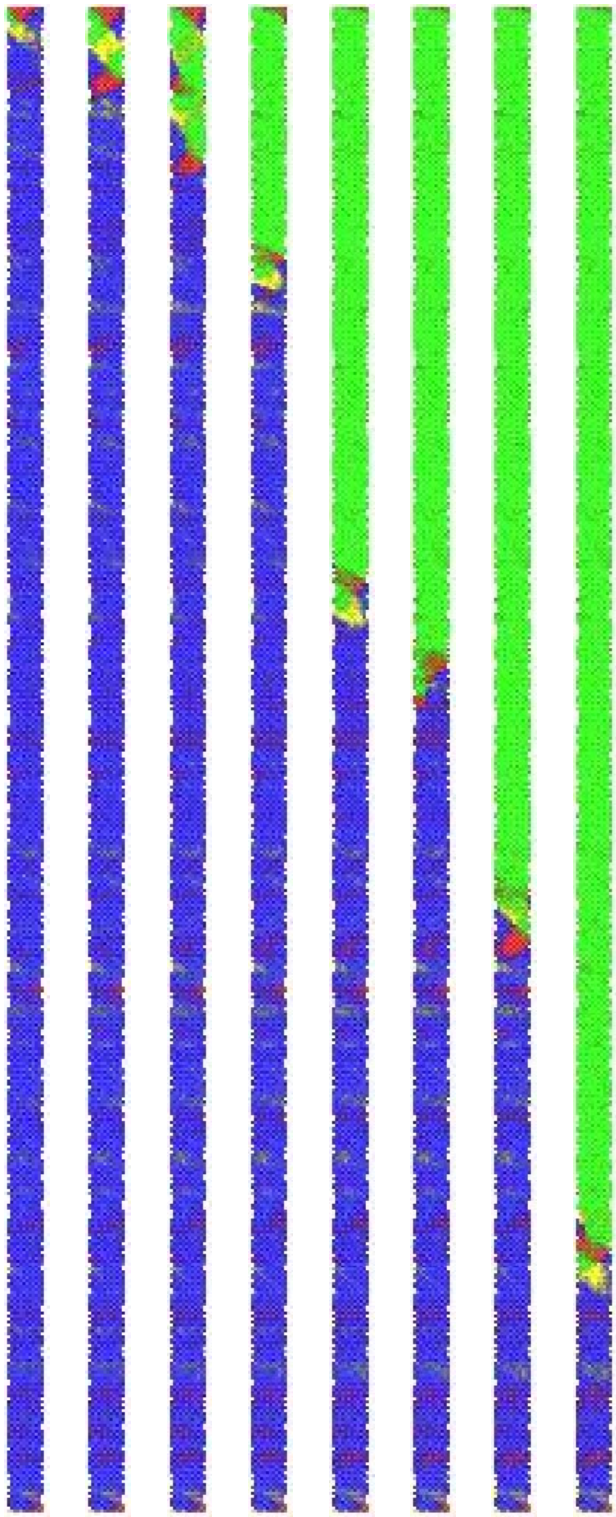


Abbildung 6.18: Momentaufnahme eines Systems der Breite 84nm mit Berücksichtigung der polykristalliner Anisotropie während der Hysterese in Abbildung 6.19 (Reduzierung des Felds von links nach rechts: $B_z = -0.14$T, -0.155T, -0.159T, -0.16T, -0.161T, -0.162T, -0.163T und -0.164T). Die Farbkodierung entspricht dem in Abbildung 4.3 dargestellten Farbkreis.

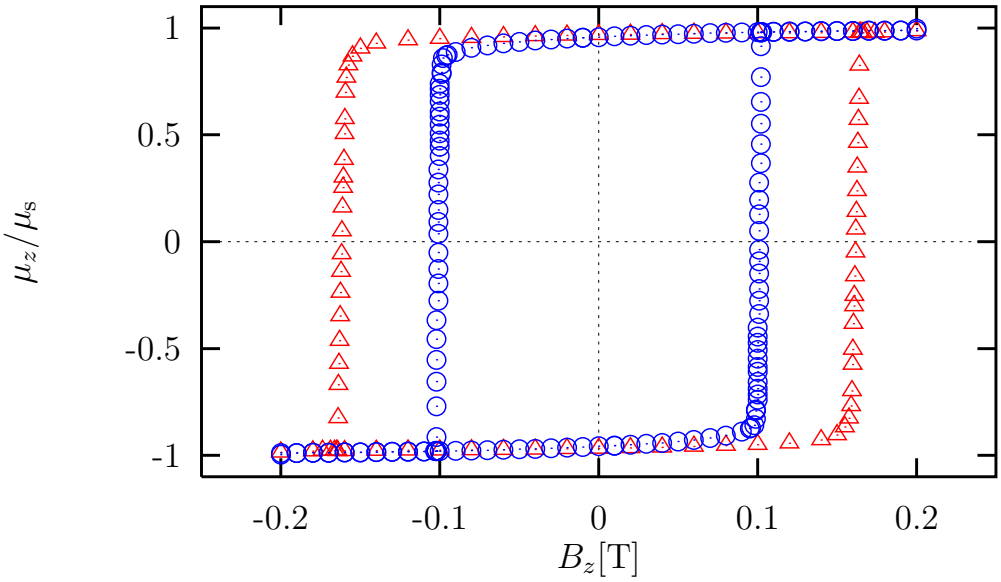


Abbildung 6.19: z-Komponente der Magnetisierung für ein System ohne Anisotropie (○) und ein System mit polykristalliner Anisotropie (△).

betrachtet. Die zugehörigen Momentaufnahmen sind in Abbildung 6.20 dargestellt. Ein Vergleich dieser Momentaufnahmen mit denen eines Systems mit vernachlässigter Anisotropie (Abbildung 6.10) zeigt, daß sich die Ummagnetisierungsmoden unterscheiden. Es entstehen wiederum raumfüllende Strukturen wie in dem System, welches keine Anisotropie besitzt. Allerdings entstehen diese Strukturen nicht nur an den Enden des Systems, sondern an mehreren Stellen des Systems gleichzeitig (vgl. Momentaufnahme bei einem Magnetfeld von 0.11T). Dies ist ein Unterschied zu dem vorher erhaltenen Mechanismus, bei dem sich die Domänenwände ausgehend von den Systemenden immer an schon vorhandenen Domänenwänden anlagern. Dies ist beispielsweise an der Momentaufnahme bei einem Magnetfeld von -0.046T in der Abbildung 6.10 zu erkennen. In beiden Systemen breiten sich diese Domänen weiter aus und verbinden sich schließlich miteinander. Auf diese Weise wird in beiden Fällen das gesamte System ummagnetisiert.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß, wie schon bei Systemen ohne Berücksichtigung der Anisotropie, in schmalen und breiten Systemen unterschiedliche Ummagnetisierungsmoden gefunden werden. In den schmalen Leiterbahnen wird das System durch das Durchlaufen einer beziehungsweise zweier Domänenwände ummagnetisiert, während in breiten Leiterbahnen in beiden Fällen komplizierte Domänenenstrukturen entstehen. Die Anisotropie hat aber einen Einfluß auf das Koerzitivfeld. Ein ähnliches Verhalten wurde von T. Schrefl u. A. gefunden. Diese haben den Einfluß der polykristallinen Struktur auf numerische Ergebnisse anhand von mikromagnetische Rechnungen von

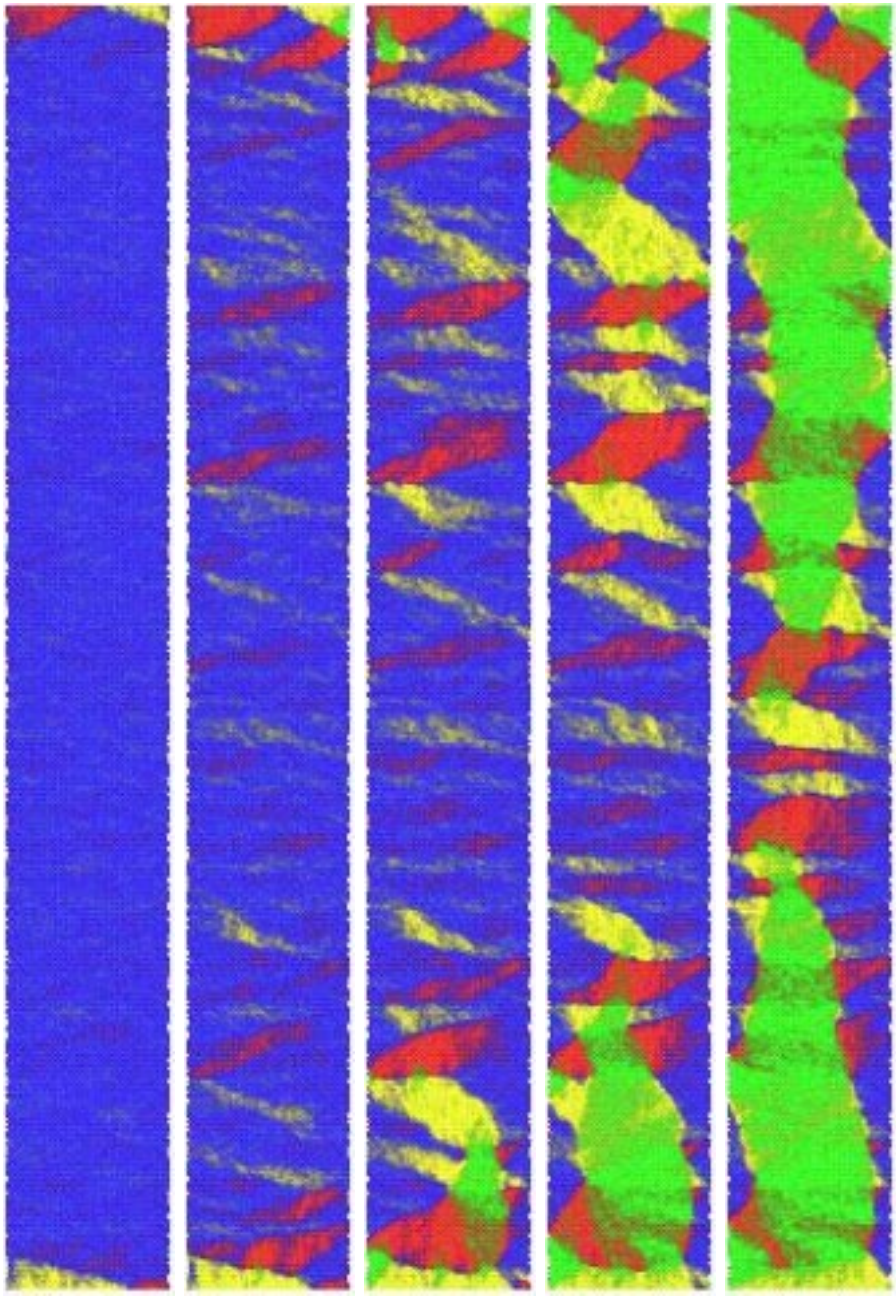


Abbildung 6.20: Momentaufnahme eines Systems der Breite 448nm mit polykristalliner Anisotropie. (Reduzierung des Felds von links nach rechts:-0.015T, -0.11T, -0.114T, -0.115T und -0.116T). Die Farbkodierung entspricht dem in Abbildung 4.3 dargestellten Farbkreis.

Co-Nanoelementen untersucht [89], und gefunden, daß die Vernachlässigung der Anisotropie unter Umständen zu anderen Werten des Koerzitivfelds führt, aber daß das Ummagnetisierungsverhalten in beiden Fällen qualitativ das gleiche ist.

Inwieweit diese Resultate, die zuvor vorgestellten Ergebnisse bezüglich der Koerzitivfelder und somit die Winkel- und Breitenabhängigkeit verändert, wird anhand weiterführender Untersuchungen zu klären sein.

7 Zusammenfassung

In dieser Dissertation wird das thermisch aktivierte Ummagnetisierungsverhalten ferromagnetischer Nanosysteme mit Hilfe von Computersimulationen untersucht. Den hierfür verwendeten numerischen Methoden liegt das klassische Heisenberg-Modell mit langreichweitiger Dipol-Dipol-Wechselwirkung und lokalen Anisotropien zugrunde.

Ein wesentlicher Aspekt dieser Arbeit ist die Entwicklung und der Test numerischer Verfahren zur Untersuchung dynamischer Prozesse. Die numerische Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit Langevin-Dynamik sowie die Monte-Carlo-Methode mit einem quantifizierten Zeitschritt (Kapitel 3.4) sind teilweise neuartig und in der Literatur nicht etabliert. Daher werden diese Verfahren sorgfältig getestet. In Kapitel 4.3 und 5.1 wird mit Hilfe einfacher Systeme gezeigt, daß die Ergebnisse beider Verfahren im überdämpften Fall zusammenfallen [25]. Die Implementierung der Fast-Fourier-Transformations-Methode zur Beschreibung der langreichweitigen Dipol-Dipol-Wechselwirkung in die Monte-Carlo-Methode ist ebenfalls neu [32]. Aus diesem Grund wird dieses Verfahren in Kapitel 3.5 ausführlich diskutiert und überprüft. Insbesondere wird auch gezeigt, daß die Beschreibung ferromagnetischer Materialien mit Hilfe von Dipolen äquivalent ist zur mikromagnetischen Beschreibung (Kapitel 4.1). Bei ausreichend klein gewählter Diskretisierung liefern beide Verfahren ähnliche numerische Ergebnisse.

Anhand des Kurzzeitverhaltens eindomäniger Systeme mit und ohne thermisches Rauschen wird ihr Relaxations- und Präzessionsverhalten in einem äußeren Magnetfeld untersucht. Es wird gezeigt, daß die Präzessions- und Relaxationsbewegung des Systems nicht nur durch das äußere Magnetfeld, sondern vielmehr durch sein inneres Feld beeinflußt wird (Kapitel 4.2), was das Ummagnetisierungsverhalten erheblich beeinflußt. Bei der Untersuchung des Langzeitverhaltens dieser Systeme (Kapitel 4.3) wird anhand der Magnetisierungskurve nachgewiesen, daß ein hinreichend kleines System auch während der Ummagnetisierung eindomänig bleibt: Es magnetisiert im Mode der kohärenten Rotation um. Die entsprechende Energiebarriere des thermischen Aktivierungsgesetzes wird mit numerischen Daten bestätigt. Hierbei werden Hinweise auf die Systemgrößenabhängigkeit des entsprechenden Vorfaktors gefunden, wie auch im Fall der Spinkette (vgl. Kapitel 5.1), deren Einfluß in analytischen Formeln nicht berücksichtigt wird. [31, 39, 40]

Das Auftreten verschiedener thermisch aktivierter Ummagnetisierungsmoden in zylindrischen Systemen wird systematisch untersucht. Die Spinkette, die einen eindimensionalen Grenzfall dieser Systeme darstellt, dient hierbei zunächst als einfaches Modellsystem. In diesem System können in Abhängigkeit von der Kettenlänge verschiedene Ummagnetisierungsmoden auftreten (Kapitel 5): im Fall kleiner Kettenlängen unterhalb der Domänenwandbreite tritt die kohärente Rotation auf und oberhalb die Soliton-Antisoliton-Nukleation. Für den überdämpften Fall werden die entsprechenden analytischen Vorfaktoren und Energiebarrieren numerisch bestätigt. Wenn die Systemparameter so gewählt werden, daß es wahrscheinlich ist, daß sich mehrere Nukleationszentren gleichzeitig ausbilden können, tritt ein weiterer Ummagnetisierungsmode auf, die *multidroplet*-Nukleation. Für diese Mode wird der Vorfaktor mit Hilfe der klassischen Nukleationstheorie analytisch hergeleitet und ebenfalls numerisch bestätigt [31, 97].

Die Übergänge zwischen den in einer Spinkette auftretenden Moden werden diskutiert. Sie werden analytisch bestimmt und teilweise numerisch bestätigt (Kapitel 5.1.4). Ein wesentliches Resultat hierbei ist, daß die charakteristische Zeit in Abhängigkeit von der Kettenlänge in der Nähe des Übergangs zwischen kohärenter Rotation und einfacher Nukleation ein Maximum besitzt [31]. Dieses Resultat kann im Bereich der magnetischen Datenspeicherung von Interesse sein, da so die Größe eines Partikels abgeschätzt werden kann, bei welcher es kohärent rotiert und gleichzeitig eine hohe thermische Stabilität besitzt.

Um realistischere Ergebnisse zu erhalten, werden ebenfalls Systeme untersucht, in denen die Dipol-Dipol-Wechselwirkung berücksichtigt wird, die in den zuvor betrachteten Modellsystemen zunächst lokal genähert wurde. Ihr Einfluß auf die auftretenden Ummagnetisierungsmoden wird anhand der Spinkette (Kapitel 5.2) sowie in dreidimensionalen, zylindrischen Systemen (Kapitel 5.3) diskutiert. In Abhängigkeit vom Zylinderdurchmesser treten verschiedene Ummagnetisierungsmoden auf. Ein sehr schmaler Zylinder verhält sich quasi wie eine Spinkette. Dieses System magnetisiert mit Hilfe eines Nukleationsprozesses um, der an den Probenenden einsetzt. Wird der Durchmesser soweit vergrößert, daß er oberhalb der Austauschlänge liegt, so wird eine Kombination aus einem Endnukleationsprozeß und *Curling* gefunden. Letztere Mode tritt ebenfalls in Rotationsellipsoiden auf.

Ferner wird in dieser Arbeit das Ummagnetisierungsverhaltens von Co-Leiterbahnen untersucht. Anhand des Verständnisses der Ummagnetisierungsmoden in Abhängigkeit von der Leiterbahnbreite können Hinweise auf den auftretenden Magnetowiderstand gezogen werden. In breiten Leiterbahnen bilden sich komplizierte, raumfüllende Domänenstrukturen aus, die sich aus 90°- und 180°-Domänenwänden zusammensetzen. Im Gegensatz dazu treten in schmalen Leiterbahnen zwei Domänenwände auf, die an den Systemenden entstehen. Der Übergang zwischen diesen beiden Moden findet etwa bei einer Breite von

100nm statt. Die Winkel- und Breitenabhängigkeit der experimentell bestimmten Koerzitivfelder wird numerisch ebenfalls gefunden [106].

Um ein Maß für den anisotropen Magnetowiderstand zu erhalten, wird die Quermagnetisierung ermittelt. Mit Hilfe dieser Größe kann qualitativ der experimentelle Verlauf des Magnetowiderstands bestätigt werden. Die mit Hilfe der Simulationen erhaltenen Hysteresekurven weisen analog zu den experimentell gewonnenen Kurven zwei Minima auf. Es kann numerisch gezeigt werden, daß diese Minima mit den Koerzitivfeldern identifiziert werden können. Die Simulationen geben allerdings keinen Aufschluß darüber, inwieweit andere auftretende Effekte wie etwa die beobachteten Domänenwände den Magnetowiderstand beeinflussen.

Die diskutierten numerischen Ergebnisse resultieren alle aus Simulationen von Systemen, in denen die polykristalline Anisotropie sowie die realistische Form der Enden, der in den Experimenten untersuchten Leiterbahnen, vernachlässigt wurde. In Kapitel 6.5 wird zunächst qualitativ gezeigt, daß diese Größen durchaus einen Einfluß auf die numerisch beobachteten Ummagnetisierungsmoden haben. Weiterführende numerische Untersuchungen dieser Einflüsse sind noch durchzuführen, allerdings gehen diese Untersuchungen über den Rahmen der vorliegenden Arbeit hinaus.

A Programmstruktur

Im folgenden wird der Aufbau des für die Simulationen verwendeten C-Programms dargestellt. Das Programm setzt sich aus einer Anzahl von Funktionen zusammen, mit deren Hilfe das Programm an verschiedene Problemstellungen angepaßt werden kann, indem die einzelnen Funktionen erweitert oder verändert werden, während der Kern des Hauptprogramms unverändert bleibt.

In Abbildung A.1 ist der Aufbau des Programms schematisch dargestellt. Die Materialparameter wie beispielsweise die Sättigungsmagnetisierung oder die Austauschkonstante für das entsprechende Material können ausgewählt werden. Es existieren zum Beispiel vorgefertigte Dateien mit den Materialparametern von Co und Fe, wie sie in Tabelle 2.2 aufgeführt sind.

Bibliotheken	
`structure1.0.c;`	verschiedene Strukturen
`methods1.0.c`	MC- und LLG-Methode
`fastfourier1.0.c`	verschiedene Fast-Fourier-Transformations-Bibliotheken
`output1.0.c`	Ausgabefunktionen
`graphik1.0.c`	2D- und 3D-Graphik

Tabelle A.1: Auflistung der Bibliotheken

Es gibt verschiedene Initialisierungsfunktionen, die es ermöglichen, die Struktur der Probe auszuwählen. In Tabelle A.2 sind verschiedene Initialisierungsfunktionen aufgelistet, die in der Bibliothek `structure1.0.c` enthalten sind. Um den prinzipiellen Aufbau dieser Initialisierungsfunktionen zu erläutern, wird im folgenden als Beispiel die Initialisierung eines Quaders herausgegriffen.

Name der Funktion	Struktur
`int Ellipsoid(...);`	Erzeugung eines Ellipsoiden mit zwei gleichen Achsen `LX=LY`
`int Zylinder(...);`	Erzeugung eines Zylinders mit zwei gleichen Achsen `LX=LY`
`int Kubus(...);`	Erzeugung eines Quaders
`int Einschnitt(...);`	Erzeugung eines Quaders mit einem Einschnitt
`int Hantel(...);`	Erzeugung einer hantelförmigen Struktur
`int Raute(...);`	Erzeugung einer hantelförmigen Struktur mit rautenförmigen Endstücken
`Twodots(...);`	Erzeugung zweier kreisförmiger Partikel

Tabelle A.2: Auflistung einige Initialisierungsfunktionen

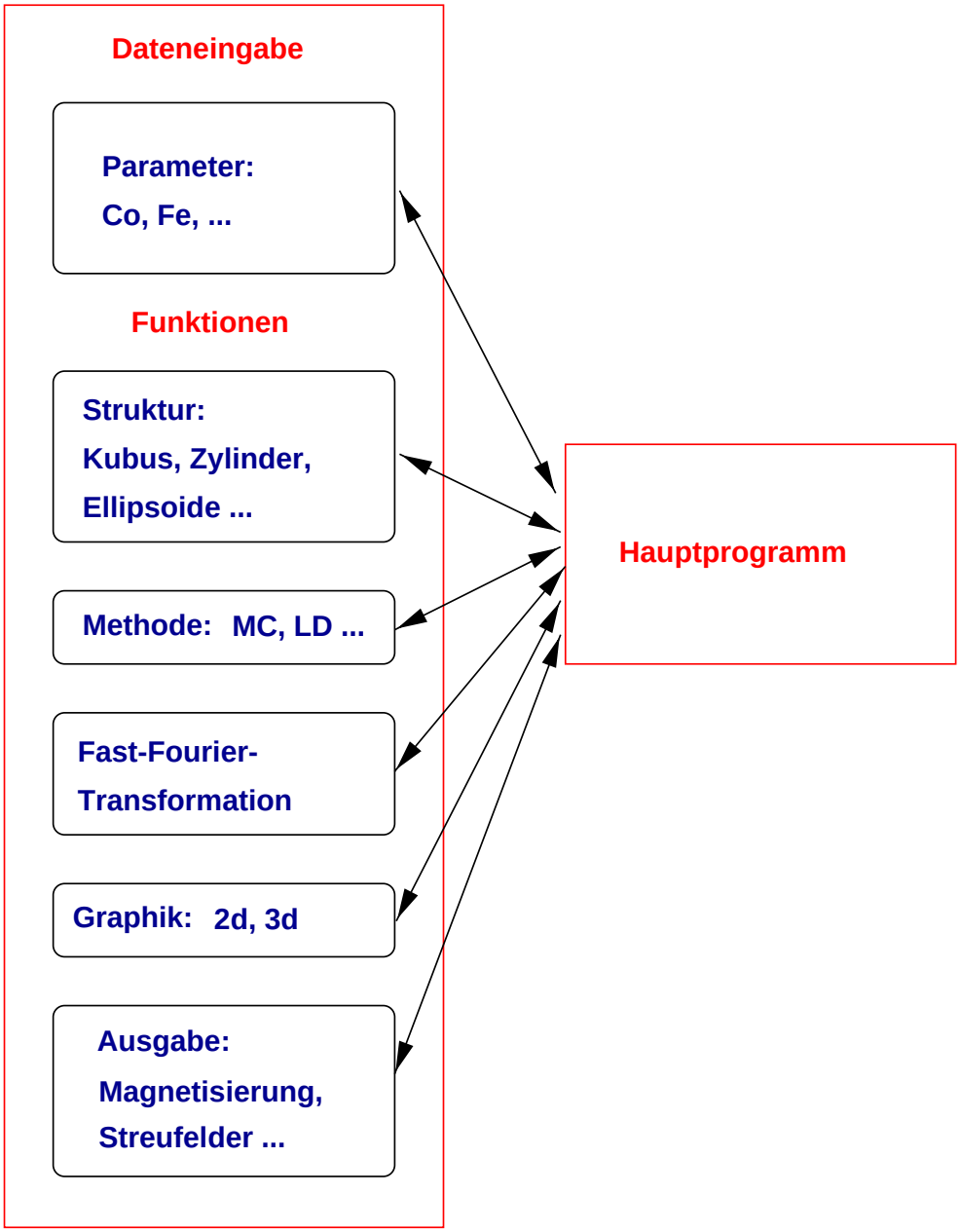


Abbildung A.1: Darstellung des Aufbaus des verwendeten Programms. Dargestellt sind die einzelnen Schritte zur Auswahl der Parameter, der Probenstruktur und Anfangsbedingungen, der Simulationsmethode, der Fast-Fourier-Transformations-Bibliotheken sowie der Graphik und der Auswertung.

Zunächst werden die Felder `sx[LX+2][LY+2][LZ+2]`, `sy[LX+2][LY+2][LZ+2]` und `sz[LX+2][LY+2][LZ+2]`, die die Spinkomponenten enthalten, sowie das Feld `find_index[LX*LY*LZ][3]`, welches die Koordinaten der besetzten Gitterplätze enthält, an die Funktion übergeben. Diese Gitterplätze werden mit 1 besetzt, wenn sie sich innerhalb eines Quaders mit den Seitenlängen `LX`, `LY` sowie `LZ` befinden, sonst mit 0. Die besetzten Plätze werden mittels der Variablen `s` aufsummiert, um die Gesamtzahl der betrachteten Spins zu erhalten. Ihre zugehörigen Koordinaten werden in das Feld `find_index[LX*LY*LZ][3]` geschrieben. Der zugehörige Quellcode ist im folgenden dargestellt:

```
int Kubus(double sx[LX+2][LY+2][LZ+2], double sy[LX+2][LY+2][LZ+2],
          double sz[LX+2][LY+2][LZ+2], int find_index[LX*LY*LZ][3]) {
  int i, j, k, s = 0;
  for(i = 0; i < LX+2; i++)  {
    for(j = 0; j < LY+2; j++) {
      for(k = 0; k < LZ+2; k++) {
        if((i == 0) || (i == LX+1) || (j == 0) || (j == LY+1)
                                   || (k == 0) || (k == LZ+1)){
          sx[i][j][k] = sy[i][j][k] = sz[i][j][k] = 0.0;
        }
        else {
          sx[i][j][k] = 0.0;
          sy[i][j][k] = 0.0;
          sz[i][j][k] = 1.0;
          find_index[s][0] = i;
          find_index[s][1] = j;
          find_index[s][2] = k;
          s++;
        }
      }
    }
  }
  return(s);
}
```

Die Auswahl der Simualtionsmethode wird über ein Makro gesteuert. Es kann zwischen der Monte-Carlo-Methode (`MC`) und der numerischen Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung mit Langevin-Dynamik (`LD`) gewählt werden. Der zugehörige Programmcode befindet sich in der Bibliothek `methods1.0.c`. Es ist ebenso möglich, die Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung ohne thermisches Rauschen zu lösen sowie den Relaxations- oder Präzessionsanteil der Bewegungsgleichung separat zu verwenden.

Es besteht die Möglichkeit, die Dipol-Dipol-Wechselwirkung durch direkte Aufsummation oder mit verschiedenen Fast-Fourier-Transformations-Bibliotheken zu berechnen. Die Auswahl der Methode zur Berechnung der Dipol-Dipol-Wechselwirkung wird wiederum über Makros gesteuert, die in Ta-

belle A.3 aufgeführt sind. Diese Funktionen sind in `fastfourier1.0.c` enthalten.

Makro	Bibliothek
`DOPPELSUM`	direkte Aufsummation
`IMSL`	IMSL
`FFTW`	FFTW
`RFFTW`	FFTW, geringster Rechenzeit- und Speicherplatzbedarf

Tabelle A.3: Auflistung der Fast-Fourier-Transformations-Bibliotheken

Die Graphik ist in der Bibliothek `graphic1.0.c` enthalten. Es besteht sowohl die Möglichkeit einer 2D als auch einer 3D Graphikausgabe. Die Ausgabe der Daten wird über die Bibliothek `output1.0.c` geregelt. Die verschiedenen Möglichkeiten der Datenausgabe sind in der Tabelle A.4 aufgeführt.

Funktionen	
`void MagKurve(...)`	Ausgabe der Magnetisierungskurve
`void Out_Tau(...)`	Ausgabe der charakteristischen Zeit
`void Ausgabe_Dipol(...)`	Ausgabe der Dipolfelder

Tabelle A.4: Auflistung einiger Funktionen zur Datenausgabe

Anhand des im folgenden abgedruckten einfachen Programms wird erläutert, wie die bisher beschriebenen Funktionen miteinander verknüpft werden. Mit Hilfe dieses einfachen Programms kann der Magnetisierungswert eines Quaders unter Verwendung der Monte-Carlo-Methode berechnet werden.

Zunächst wird die Systemgröße sowie die Zellgröße vorgegeben. Anschließend wird mit Hilfe des Makros `MC` die Monte-Carlo-Methode ausgewählt und die in diesem Zusammenhang benötigten Größen, wie die Anzahl der MCS, werden vorgegeben. Weiterhin wird die Fast-Fourier-Transformations-Bibliothek ausgewählt, die für die Simulation verwendet werden soll. In diesem Fall handelt es sich um die `RFFTW`-Bibliothek. Nun werden noch die Materialparameter für Fe aus der Datei `Fe.h` eingelesen, und die Werte für das gyromagnetische Verhältnis `GAMMA` und die Dämpfungskonstante `Alph` werden vorgegeben. Anschließend werden die Bibliotheken `stdheader1.h`, `structure1.0.c`, `fastfourier1.0.c`, `methods1.0.c` und `output1.0.c` eingelesen. Die Bibliothek `stdheader1.h` beinhaltet die benötigten Standard-Bibliotheken wie beispielsweise `math.h` und einige nützliche Definitionen. Der Inhalt der anderen Funktionen wurde schon vorgestellt.

Im Hauptprogramm `main()` werden zunächst die Variablen deklariert, die für die Simulationen benötigt werden. Hierzu gehören die benötigten Fel-

der wie beispielsweise `sx[LX+2][LY+2][LZ+2]`, `sy[LX+2][LY+2][LZ+2]` und `sz[LX+2][LY+2][LZ+2]` und `find_index[LX*LY*LZ][3]`, sowie die Temperatur `t` und die Magnetfelder `Bx`, `By` und `Bz`.

Anschließend wird ein Quader initialisiert und die Anfangsbedingungen gesetzt, indem die Funktion `Kubus(sx,sy,sz,find_index)` aufgerufen wird, die in `structure1.0.c` enthalten ist. Diese Funktion besitzt als Rückgabewert die Anzahl der besetzten Plätze. Anschließend werden die Dipolfelder initialisiert und berechnet. Dies geschieht durch den Aufruf der Funktionen `Init_dipol(spin, find_index,2*LX, 2*LY,2*LZ)` und `Dipolfelder(2*LX,2*LY,2*LZ,sx,sy,sz,dip_x,dip_y,dip_z)`, die in `fastfourier1.0.c` enthalten sind. Nach der Initialisierung wird nun der Kopf der Datei zur Ausgabe der Magnetisierung erzeugt. Die Funktion befindet sich in `output1.0.c`.

Im nächsten Schritt wird das Monte-Carlo-Verfahren angewandt, um den Magnetisierungswert der Probe zu berechnen. Hierzu wird die Funktion `Heat(...)` aufgerufen. Diese Funktion ist in der Bibliothek `methods1.0.c` enthalten. Die berechneten Größen werden in das Ergebnisfeld `result` geschrieben und ausgegeben. Das Hauptprogramm wird anschließend beendet.

```
/* ************************* STRUKTUR ********************************** */
#define LX 4                                /* Gittergroesse in x-Richtung */
#define LY 4                                /* Gittergroesse in y-Richtung */
#define LY 64                               /* Gittergroesse in z-Richtung */
#define A 1.e-8                                          /* Zellengroesse */
/* ************************* METHODEN ********************************** */
#define MC                                        /* Methode: MC oder LD */
#define MCS 3000                          /* Zahl der MCS pro Punkt bei MC */
#define DELTAT 0.025       /* simuliertes Zeitintervall eines MCS -> RADIUS */
#define UPDATE 10                  /* Berechnung der Dipolfelder nach x MCS */
#define RFFTW                                    /* Fast Fourier mit RFFTW */
/* ************************* Parameter ********************************** */
#include "Fe.h"                                  /* Test.h, Fe.h oder Co.h */
#define GAMMA 1.                                /* Prop-Faktor, Relaxation */
#define ALPH 4.                                     /* Daempfungskonstante */
/* ************************* Include Bibliotheken ********************** */
#include "stdheader1.0.h"                /* einige nuetzliche Definitionen */
#include "structure1.0.c"                       /* verschiedene Strukturen */
#include "fastfourier1.0.c"               /* verschiedene FFT-Bibliotheken */
#include "methods1.0.c"                             /* MC- und LLG-Methode */
#include "output1.0.c"                                /* Ausgabe-Routinen */
/* ************************* Hauptprogramm ****************************** */
main () {
  double sx[LX+2][LY+2][LZ+2], sy[LX+2][LY+2][LZ+2], sz[LX+2][LY+2][LZ+2];
                                                        /* Spinkomponenten */
  static double dip_x[LX+2][LY+2][LZ+2], dip_y[LX+2][LY+2][LZ+2],
   dip_z[LX+2][LY+2][LZ+2];                                  /* Dipolfelder */
  int spin;                                          /* Anzahl der Spins... */
  int find_index[LX*LY*LZ][3];          /* zeigt auf besetzte Gitterplaetze */
  static double result[10];                                /* Ergenbnisfeld */
  double t, Bx = 0.0, By = 0.0, Bz, RADIUS = 0.0;
                                          /* Temp., Felder, Oeffnungswinkel */
  spin = Kubus(sx, sy, sz, find_index);
                                     /* Gitter erzeugen, Anfangsbed. setzen */
  Init_dipol(spin, find_index, 2*LX, 2*LY, 2*LZ);
                                /* Initialisierung fuer Dipolfeldberechnung */
  Dipolfelder(2*LX,2*LY,2*LZ,sx,sy,sz,dip_x,dip_y,dip_z);
                                        /* erste Berechnung des Dipolfeldes */
  MagKurve(t,spin,result,Bz);                       /* Kopf der Datei ausgeben */
  Heat(spin,t,Bx,By,Bz,result,RADIUS,sx,sy,sz,dip_x,dip_y,dip_z,find_index);
                                       /* Aufruf des Monte Carlo-Verfahrens */
  result[0] = MCS;                                          /* Ergebnisfeld */
  MagKurve(t,spin,result,Bz);                          /* Ausgabe der Daten */
  exit(0);                                              /* Programm beenden */
}
```

Literaturverzeichnis

[1] D. D. Awschalom und D. P. DiVincenzo, *Complex Dynamics of Mesocopic Magnets*, Physics Today **4**, 43 (1995).

[2] F. J. Himpsel, J. E. Ortega, G. J. Mankey und R. F. Willis, *Magnetic nanostructures*, Adv. Phys **47**, 511 (1998).

[3] G. Prinz und K. Hathaway, *Magnetotronic*, Physics Today **4**, 24 (1995).

[4] A. Hubert und R. Schäfer, *Magnetic Domains* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).

[5] A. Aharoni, *Introduction to the Theory of Ferromagnetism* (Oxford University Press, Oxford, 1996).

[6] D. L. Landau und E. Lifshitz, *On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*, Phys. Z. Sowjetunion **8**, 153 (1935).

[7] E. C. Stoner und E. P. Wohlfarth, *A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys*, Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A **240**, 599 (1949).

[8] L. Néel, *Theorie du trainage magnetique des ferromagnetiques en grains fins avec applications aux terres cuites*, Ann. Geophys. **5**, 99 (1949).

[9] W. F. Brown, *Thermal Fluctuations of a single-domain particle*, Phys. Rev. **130**, 1677 (1963).

[10] I. Klik und L. Gunther, *First-Passage-Time Approach to Overbarrier Relaxation of Magnetization*, J. Stat. Phys. **60**, 473 (1990).

[11] H. B. Braun, *Kramer's rate theory, broken symmetries, and magnetization reversal*, J. Appl. Phys. **76**, 6310 (1994).

[12] W. T. Coffey, D. S. F. Crothers, J. L. Dorman, Y. P. Kalmykov, E. C. Kennedy und W. Wernsdorfer, *Thermally activated relaxation time of a single domain ferromagnetic particle subjected to a uniform field at an oblique angle to the easy axis: Comparison with experimental observations*, Phys. Rev. Lett. **80**, 5655 (1998).

[13] R. W. Chantrell und K. O'Grady, *The magnetic properties of fine particles*, in *Applied Magnetism*, hrsg. von R. Gerber, C. D. Wright und G. Asti (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1994).

[14] U. Nowak, *Thermally activated reversal in magnetic nanostructures*, in *Annual Reviews of Computational Physics IX*, hrsg. von D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 2000), S. 105.

[15] D. Loss, *Quantum dynamics in mesoscopic magnetism*, in *Dynamical Properties of Unconventionel Magnetic Systems*, hrsg. von A. T. Skjeltrop und D. Sherrington (Kluwer, Dordrecht, 1998).

[16] W. Wernsdorfer und R. Sessoli, *Quantum phase interference and parity effects in magnetic molecular clusters*, Science **284**, 133 (1999).

[17] W. Wernsdorfer *et al.*, *Experimental Evidence of the Neéel-Brown model of magnetization reversal*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1791 (1997).

[18] W. Wernsdorfer, K. Hasselbach, A. Sulpice, A. Benoit, J.-E. Wegrowe, L. Thomas, B. Barbara und D. Mailly, *Dynamical measurement of domain-wall nucleation and annihilation in individual amorphous Co particles*, Phys. Rev. B **53**, 3341 (1996).

[19] W. Wernsdorfer, B. Doudin, D. Mailly, K. Hasselbach, A. Benoit, J. Meier, J. P. Ansermet und B. Barbara, *Nucleation of magnetization reversal in individual nanosized nickel wires*, Phys. Rev. Lett. **77**, 1873 (1996).

[20] W. Wernsdorfer, K. Hasselbach, A. Benoit, B. Barbara, B. Doudin, J. Meier, J. P. Ansermet und D. Mailly, *Measurements of magnetization switching in individual nickel nanowires*, Phys. Rev. B **55**, 11552 (1997).

[21] D. Stauffer, *Ising droplets, nucleation, and stretched exponential relaxation*, Int. J. Mod. Phys. C **3**, 1059 (1992).

[22] P. A. Rikvold, H. Tomita, S. Miyashita und S. W. Sides, *Metastable lifetimes in a kinetic Ising model: Dependence on field and system size*, Phys. Rev. E **49**, 5080 (1994).

[23] P. A. Rikvold, M. A. Novotny, M. Kolesik und H. L. Richards, *Nucleation theory of magnetization switching in nanoscaled ferromagnets*, in *Dynamical properties of unconventional magnetic systems*, hrsg. von A. T. Skjeltrop und D. Sherrington (Kluwer, Dordrecht, 1998).

[24] M. Acharyya und D. Stauffer, *Nucleation and hysteresis in Ising model: classical theory vs. computer simulation*, Euro. Phys. J. B **5**, 571 (1998).

[25] D. Hinzke und U. Nowak, *Magnetization switching in a Heisenberg model for small ferromagnetic particles*, Phys. Rev. B **58**, 265 (1998).

[26] U. Nowak und D. Hinzke, *Magnetization switching in small ferromagnetics particles: Nucleation and coherent rotation*, J. Appl. Phys. **85**, 4337 (1999).

[27] J. M. Gonzáles, R. Ramírez, R. Smirnov-Rueda und J. González, *Non-Arrhenius relaxation in micromagnetic models of systems with many degrees of freedom*, Phys. Rev. B **52**, 16034 (1995).

[28] J. M. Gonzáles, R. Smirnov-Rueda und J. González, *Micromagnetic simulation of the relaxation processes taking place*, J. Appl. Phys. **81**, 5573 (1997).

[29] U. Nowak, R. W. Chantrell und E. C. Kennedy, *Monte Carlo simulation with time step quantification in terms of Langevin dynamics*, Phys. Rev. Lett. **84**, 163 (2000).

[30] R. Smirnov-Rueda, O. Chubykalo, U. Nowak, R. W. Chantrell und J. M. Gonzáles, *Real Time Quantification of Monte Carlo Steps for Different*

Time Scales, J. Appl. Phys. **87**, 4798 (2000).

[31] D. Hinzke und U. Nowak, *Magnetic relaxation in a classical spin chain as model for nanowires*, Phys. Rev. B **61**, 6734 (2000).

[32] D. Hinzke und U. Nowak, *Monte Carlo simulations with dipolar fields calculation by use of fast Fourier transformations*, J. Magn. Magn. Mat. **221**, 365 (2000).

[33] A. Lyberatos und R. W. Chantrell, *Thermal Fluctuations in a pair of magnetostatistically coupled particles*, J. Appl. Phys. **73**, 6501 (1993).

[34] Y. Nakatani, Y. Uesaka, N. Hayashi und H. Fukushima, *Computer simulation of thermal fluctuation of fine particle magnetization based on Langevin equation*, J. Magn. Magn. Mat. **168**, 347 (1997).

[35] J. L. García-Palacios und F. J. Lázaro, *Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles*, Phys. Rev. B **58**, 14937 (1998).

[36] R. W. Chantrell, J. D. Hannay, M. Wongsam, T. Schrefl und H.-J. Richter, *Computational approaches to thermally activated fast relaxation*, IEEE Trans. Mag. **34**, 1839 (1998).

[37] K. Zhang und D. R. Fredkin, *Stochastic dynamic micromagnetic study of fine particles*, J. Appl. Phys. **85**, 5208 (1999).

[38] W. Scholz, T. Schrefl und J. Fidler, *Micromagnetic simulation of thermally activated switching in fine particles*, J. Magn. Magn. Mat. **233**, 296 (2001).

[39] D. Hinzke, U. Nowak und K. D. Usadel, *Thermally assisted magnetization reversal in nanostructures*, Phase Transitions (2002), in Druck.

[40] U. Nowak und D. Hinzke, *Magnetic nanoparticles: the Simulations of Thermodynamic Properties*, Adv. Solid State Phys. **41**, (2002), in Druck.

[41] W. T. Coffey, D. S. F. Crothers, J. L. Dorman, L. J. Geoghegan und E. C. Kennedy, *Effect of an oblique magnetic field on the superparamagnetic*

relaxation time. II. Influence of the gyromagnetic term, Phys. Rev. B **58**, 3249 (1998).

[42] D. A. Garanin, E. C. Kennedy, D. S. F. Crothers und W. T. Coffey, *Thermally activated escape rates of uniaxial spin systems with transverse field: Uniaxial crossover*, Phys. Rev. E **60**, 6499 (1999).

[43] H. B. Braun, *Thermally activated magnetization in elongated ferromagnetic particles*, Phys. Rev. Lett. **71**, 3557 (1993).

[44] H. B. Braun, *Fluctuations and instabilities of ferromagnetic domain-wall pairs in an external magnetic field*, Phys. Rev. B **50**, 16485 (1994).

[45] H. B. Braun, *Nucleation in ferromagnetic nanowires — magnetostatics and topology*, J. Appl. Phys. **85**, 6172 (1999).

[46] C. H. Back, D. Weller, J. Heodmann, D. Mauri, D. Guarisco, E. L. Garwin und H. C. Siegmann, *Magnetization reversal in ultrashort magnetic field pulses*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3251 (1998).

[47] C. H. Back, R. Allenspach, W. Weber, S. Parkin, D. Weller, E. L. Garwin und H. C. Siegmann, *Minimum Field Strength in Precessional Magnetization Reversal*, Science **285**, 864 (1999).

[48] M. Bauer, J. Fassbender und B. Hillebrands, *Switching behavior of Stoner-like magnetic thin film elements*, J. Appl. Phys. **87**, 6274 (2000).

[49] M. Bauer, J. Fassbender, B. Hillebrands und R. L. Stamps, *Switching behavior of Stoner particles beyond the relaxation time limit*, Phys. Rev. Lett. **61**, 3410 (2000).

[50] T. Leineweber und H. Kronmüller, *Influence of the intrinsic dynamics of the magnetisation on the hysteresis loop*, Physica B **275**, 5 (2000).

[51] W. Heisenberg, *Zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys **49**, 619 (1928).

[52] W. F. Brown, *Micromagnetics* (Wiley, New York, 1963).

[53] J. D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik* (de Gruyter, Berlin, New York, 1983).

[54] B. D. Cullity, *Introduction to Magnetic Materials* (Addison-Wesley, Menlo Park, California, 1972).

[55] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (Oldenburg, München, 1999).

[56] W. F. Brown, *Magnetostatic Principles in Ferromagnetism* (North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1962).

[57] T. L. Gilbert, *A Lagrangian formulation of the gyromagnetic equation of the magnetization field*, Phys. Rev. **100**, 1243 (1955).

[58] A. P. Malozemoff und J. C. Slonczewski, *Magnetic Domain Walls in Bubble Materials* (Academic Press, New York, 1979).

[59] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1965).

[60] J. Schnakenberg, *Algorithmen in der Quantentheorie und Statistischen Physik* (Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1995).

[61] W. T. Coffey, *The Langevin Equation* (World Scientific, Singapore, 1996).

[62] H. A. Kramers, *Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions*, Physica **7**, 284 (1940).

[63] W. T. Coffey, D. S. F. Crothers, J. L. Dorman, L. J. Geoghegan, E. C. Kennedy und W. Wernsdorfer, *Range of validity of Kramers escape rates for non-axially symmetric problems in superparamagnetic relaxation*, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 9093 (1998).

[64] A. Lyberatos, D. V. Berkov und R. W. Chantrell, *A method for the numerical simulation of the thermal magnetization fluctuations in micromagnetics*, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 8911 (1993).

[65] B. Øksendal, *Stochastic Differential Equations* (Springer Verlag, Berlin,

2000).

[66] A. Greiner, W. Strittmatter und J. Honerkamp, *Numerical integration of stochastic differential equation*, J. Stat. Phys. **51**, 95 (1988).

[67] D. E. Wolf, *Stochastic differential equations*, in *Advances in Computer Simulation*, hrsg. von I. Kondor und J. Kertész (Springer, Heidelberg, 1998), S. 104.

[68] S. E. Koonin, *Computational Physics* (Benjamin-Cummings, Menlo Park, Californien, 1986).

[69] J. Honerkamp, *Stochastische Dynamische Systeme* (VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1990).

[70] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, Cambridge, 1990).

[71] S. W. Yuan und H. N. Bertram, *Fast adaptive algorithm for micromagnetics*, IEEE Trans. Mag. **28**, 2031 (1992).

[72] D. V. Berkov, K. R. Ramstöck und A. Hubert, *Solving micromagnetic problems*, Phys. stat. sol. (a) **137**, 207 (1993).

[73] *http://www.fftw.org.*

[74] K. Binder und D. W. Heermann, in *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, hrsg. von P. Fulde (Springer-Verlag, Berlin, 1997).

[75] D. Stauffer, F. W. Hehl, V. Winkelmann und J. G. Zabolitzky, *Computer Simulation and Computer Algebra* (Springer Verlag, Berlin, 1993).

[76] D. Hinzke und U. Nowak, *Monte Carlo Simulation of Magnetization Switching in a Heisenberg Model for Small Ferromagnetic Particles*, Comp. Phys. Com. **121-122**, 343 (1999).

[77] F. Vesely, *Computational Physics* (Universitätsverlag, Wien, 1993).

[78] G. Marsaglia, *Choosing a point from the surface of a sphere*, Ann. Math.

Stat. **43**, 645 (1972).

[79] R. Ettelaie und M. A. Moore, *Comparison of Langevin and Monte Carlo dynamics*, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 3505 (1984).

[80] A. Hucht, A. Moschel und K. D. Usadel, *Monte-Carlo study of the reorientation transition in Heisenberg models with dipolar interaction*, J. Magn. Magn. Mat. **148**, 32 (1995).

[81] A. E. LaBonte, *Two-dimensional Bloch-type domain walls in ferromagnetic films*, J. Appl. Phys. **40**, 2450 (1969).

[82] A. Hubert, *Stray-field-free magnetization configurations*, phys. stat. sol. **32**, 519 (1969).

[83] W. F. Brown und A. E. LaBonte, *Structure and Energy of one-dimensional walls in Ferromagnetic thin films*, J. Appl. Phys. **36**, 1380 (1965).

[84] Y. Nakatani, Y. Uesaka und N. Hayashi, *Direct solution of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation for micromagnetics*, Japan. J. Appl. Phys. **28**, 2485 (1989).

[85] M. E. Schabes und H. N. Bertram, *Magnetization prozesses in ferromagnetic cubes*, J. Appl. Phys. **64**, 1347 (1988).

[86] T. Schrefl, J. Fidler, R. W. Chantrell und M. Wongsam, *Micromagnetics II: Finite element approaches*, Encyclopedia of Materials: Science and Technology, hrsg. von K. H. J. Buschow, R. W. Cahn, M. C. Flemings, B. Ilschner, E. J. Kramer und S. Mahajan (Elsevier, Amsterdam, 2001), S. 5642.

[87] T. R. Koehler und D. R. Fredkin, *Finite element methods for micromagnetics*, IEEE Trans. Magn. **28**, 1239 (1992).

[88] H. Kronmüller und R. Hertel, *Computational micromagnetism of magnetic structures and magnetisation processes in small particles*, J. Magn. Magn. Mat. **215-216**, 11 (2000).

[89] T. Schrefl, J. Fidler, D. Süss und W. Scholz, *Hysteresis and switching dynamics of patterned magnetic elements*, Physica B **275**, 55 (2000).

[90] T. Schrefl, J. Fidler, K. J. Kirk und J. N. Chapman, *Simulation of magnetization reversal in polycrystalline patterned Co-elements*, J. Appl. Phys. **85**, 6169 (1999).

[91] *http://math.nist.gov/oommf/*.

[92] J. Fidler und T. Schrefl, *Micromagnetic modelling — the current state of the art*, J. Phys. D: Appl. Phys. **33**, R135 (2000).

[93] E. D. Boerner und H. N. Bertram, *Dynamics of thermally activated reversal in nonuniformly magnetized single particles*, IEEE Trans. Mag. **33**, 3052 (1997).

[94] D. Jiles, *Introduction to magnetism and magnetic materials* (Chapman and Hall, London, 1995).

[95] H. Stöcker, *Taschenbuch mathematischer Formeln und moderner Verfahren* (Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1993).

[96] A. Aharoni, *Comment on Krammer's rate theory, broken symmetries, and magnetization reversal*, J. Appl. Phys. **80**, 3133 (1996).

[97] D. Hinzke, U. Nowak und K. D. Usadel,*Thermally activated magnetization reversal in classical spin chains*, in *Structure and Dynamics of Heterogenous Systems*, hrsg. von P. Entel und D. E. Wolf (World Scientific, Singapore, 2000).

[98] P. A. Rikvold und B. M. Gorman, *Recent results on the decay of metastable phases*, in *Annual Reviews of Computational Physics I*, hrsg. von D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 1994), S. 149.

[99] R. Becker und W. Döring, *Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen*, Ann. Physik (Leipzig) **24**, 719 (1935).

[100] H. B. Braun, *Stochastic magnetization dynamics in magnetic nanostruc-*

tures: From Néel-Brown to soliton-antisoliton creation, in *Structure and Dynamics of Heterogenous Systems*, hrsg. von P. Entel und D. E. Wolf (World Scientific, Singapore, 2000).

[101] T. Chang, J.-G. Zhu und J. H. Judy, *Method for investigating the reversal properties of isolated barium ferrite fine particles utilizing MFM*, J. Appl. Phys. **73**, 6716 (1993).

[102] A. Aharoni, *Curling reversal mode in nonellipsoidal ferromagnetic particles*, J. Appl. Phys. **86**, 1041 (1999).

[103] Y. Jaccard, P. Guittienne, D. Kelly, J.-E. Wegrowe und J.-P. Ansermet, *Uniform magnetization rotation in single ferromagnetic nanowires*, Phys. Rev. B **62**, 1141 (2000).

[104] J.-E. Wegrowe, D. Kelly, A. Franck, S. E. Gilbert und J.-P. Ansermet, *Magnetoresistance of ferromagnetic nanowires*, Phys. Rev. Lett. **82**, 3681 (1999).

[105] A. Fert und L. Piraux, *Magnetic nanowires*, J. Magn. Magn. Mat. **200**, 338 (1999).

[106] B. Hausmanns, T. P. Krome, G. Dumpich, E. F. Wassermann, D. Hinzke, U. Nowak und K. D. Usadel, *Magnetization reversal process in Co nanowires*, J. Magn. Magn. Mat. (2002), in Druck.

[107] T. P. Krome, B. Hausmanns und G. Dumpich, *Magnetoresistance of single Co nanowires*, J. Magn. Magn. Mat. (2002), eingereicht.

[108] K. M. Hong und N. Giordano, *New Effects in Ferromagnetic Measurements*, J. Magn. Magn. Mat. **151**, 396 (1995).

[109] K. M. Hong und N. Giordano, *Approach to Mesocopic Magnetic Measurements*, Phys. Rev. B **51**, 9855 (1995).

[110] S. J. Blundell, C. Shearwood, M. Gester, M. J. Baird, J. A. C. Bland und H. Ahmed, *The Magnetoresistance of Submicron Fe Wires*, J. Magn.

Magn. Mat. **135**, L17 (1994).

[111] C. Shearwood, S. J. Blundell, M. J. Baird, J. A. C. Bland, M. Gester und H. Ahmed, *Magnetoresistance and Magnetization in Submicron Ferromagnetic Gratings*, J. Appl. Phys. **75**, 5249 (1994).

[112] J.-E. Wegrowe, D. Kelly, Y. Jaccard, P. Guittienne und J.-P. Ansermet, *Current-induced magnetization reversal in magnetic nanowires*, Europhys. Lett. **45**, 626 (1999).

[113] R. Ferré, K. Ounadjela, J. M. George, L. Piraux und S. Dubois, *Magnetization prozesses in nickel and cobalt electrodeposited nanowires*, Phys. Rev. B **56**, 14066 (1997).

[114] T. P. Krome, *Transport in nanostrukturierten magnetischen Leiterbahnen* (Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, 2000).

[115] I. Mertig, *30. IFF-Ferienkurs: Magnetische Schichtsysteme* (Institut für Festkörperforschung der Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich, 1999).

[116] U. Ebels, A. Radulescu, Y. Henry, L. Piraux und K. Ounadjela, *Spin Accumulation and Domain Wall Magnetoresistance in 35nm Co Wires*, Phys. Rev. Lett. **84**, 983 (2000).

[117] U. Rüdiger, J. Yu, L. Thomas, S. S. P. Parkin und A. D. Kent, *Magnetoresistance, micromagnetism, and domain-wall scattering in epitaxial hcp Co films*, Phys. Rev. B **59**, 11914 (1999).

[118] T. Taniyama, I. Nakatani, T. Namikawa und Y. Yamazaki, *Resistivity due to domain walls in Co zigzag wires*, Phys. Rev. Lett. **82**, 2780 (1999).

[119] P. M. Levy und S. Zhang, *Resistivity due to domain wall scattering*, Phys. Rev. Lett. **79**, 5110 (1997).

[120] R. P. van Gorkom, J. Caro, S. J. C. H. Theeuwen, K. P. Wellock und N. N. Gribov, *Mikromagnetics and magnetoresistance of a permalloy point contact*, Appl. Phys. Lett. **74**, 422 (1999).

[121] R. P. van Gorkom, A. Brataas und G. E. W. Bauer, *Negative domain wall resistance in ferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4401 (1999).

[122] G. Tatara und H. Fukuyama, *Resistivity due to domain wall in ferromagnetic metal*, Phys. Rev. Lett. **78**, 3773 (1997).

[123] A. Fert und C. Vouille, *30. IFF-Ferienkurs: Magnetische Schichtsysteme* (Institut für Festkörperforschung der Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich, 1999).

[124] R. W. DeBlois und C. D. J. Graham, *Domain Observations on Iron Whiskers*, J. Appl. Phys. **29**, 1931 (1958).

[125] *http://www.ctcms.nist.gov/∼rdm/mumag.html*.

[126] R. D. McMichael und M. J. Donahue, *Micromagnetic computational standard problem*, J. Appl. Phys. **81**, 5242 (1997).

[127] B. B. Pant, *Effect of interstrip gap on the sensitivity of high sensitivity magnetoresistive transducers*, J. Appl. Phys. **79**, 6123 (1996).

Danke

an Prof. Dr. K. D. Usadel und Dr. habil. U. Nowak dafür, daß sie mir die Gelegenheit zu dieser Arbeit gegeben und mit ihrer fortwährenden Betreuung zu ihrem Entstehen beigetragen haben.

ebenfalls an Dr. habil. G. Dumpich und Dipl. Phys. Thorsten Krome für die Überlassung von Datenmaterial und ausführliche Diskussionen aus dem Bereich der Experimentalphysik. Einen besonderen Dank an Dipl. Phys. Britta Hausmanns dafür, daß sie sich durch das Manuskript dieser Arbeit gequält hat.

an Dr. Fred Hucht, Dr. Sven Lübeck, Dipl. Phys. Lars Roters für die vielen Tips und Hinweise und an alle Mitarbeiter der Theoretischen Tieftemperaturphysik für das angenehme und freundschaftliche Arbeitsklima.

an Dr. H.-B. Braun und Dr. D. Garanin für zahlreiche anregende Diskussionen. Besonders danken möchte ich Dr. habil. T. Schrefl für seine Unterstützung und seine Diskussionsbereitschaft während meines Aufenthalts in Wien.

an die Deutsche Forschungsgemeinschaft, die die Entstehung dieser Arbeit im Rahmen des Graduiertenkollegs *Struktur und Dynamik heterogener Systeme* sowie im Rahmen des Einzelprojektes *Computersimulation zur thermischen Aktivierung von magnetischen Materialien* gefördert hat. Danke auch an die EU für die (zugesagte, aber noch nicht erfolgte) Finanzierung meines Aufenthalts in Wien im Rahmen von COST.

an all diejenigen, die das Entstehen dieser Arbeit von privater Seite gefördert haben, an meine Freunde und Familie, insbesondere an meine Eltern.