

**Streufeldinduzierte Ordnung
und Anisotropie
wechselwirkender Teilchen in
zweidimensionalen
periodischen und quasiperiodischen
Anordnungen**

**Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Universität Hamburg**

vorgelegt von
Dipl.-Phys. Nikolai Mikuszeit
aus Kellinghusen

Hamburg
2004

Gutachter der Dissertation:

Prof. Dr. H. P. Oepen

Prof. Dr. J. Kötzler

Gutachter der Disputation:

Prof. Dr. J. Kötzler

Prof. Dr. A. Lichtenstein

Datum der Disputation:

11.08.2004

Vorsitzender des Prüfungsausschusses:

Priv.-Doz. Dr. D. Grundler

Vorsitzender des Promotionsausschusses:

Prof. Dr. R. Wiesendanger

Dekan des Fachbereichs Physik:

Prof. Dr. G. Huber

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit werden das Streufeld und die Streufeldwechselwirkung polarisierter (magnetisierter) Teilchen potentialtheoretisch behandelt. Ein wesentlicher Gesichtspunkt ist dabei das Auffinden optimaler Geometrien periodischer Anordnungen, welche das Streufeld bzw. die Streufeldmodulation maximieren. Strukturen mit optimierten Streufeldern sind in der Grundlagenforschung, z. B. als Molekülfallen in der Quantenoptik oder zum Erzeugen eines modulierten Potentials in der Halbleiterphysik, von großer Bedeutung. Es werden ein- und zweidimensionale Gitter mit unterschiedlichen Teilchenformen und Magnetisierungsrichtungen untersucht. Dabei werden beispielhaft Geometrien und Größenordnungen behandelt, die experimentell relevant sind oder es in naher Zukunft vermutlich werden. Da in dichtgepackten Systemen auch die Wechselwirkung der Teilchen untereinander von Bedeutung ist, wird ein Formalismus entwickelt, welcher die analytische Multipolentwicklung und somit die Reihenentwicklung der Streufeldwechselwirkung einer großen Klasse von Formen polarisierter Körper ermöglicht. Die Wechselwirkung unterschiedlicher Modellmultipole wird systematisch auf periodischen und quasiperiodischen zweidimensionalen Gittern mittels Monte Carlo-Methoden untersucht. Multipolmomente hoher Ordnung zeigen in der Wechselwirkung eine starke Winkelabhängigkeit der Energie bezüglich der Orientierung im Raum. Da unterschiedliche Momente jeweils andere relative Ausrichtungen begünstigen, kann diese Wechselwirkung genutzt werden, um Selbstorganisationsprozesse zu kontrollieren. Diese multipolbedingten Ordnungsphänomene werden ebenso wie multipolinduzierte Anisotropie berechnet. Selbstorganisationsprozesse liefern wiederum eine Möglichkeit großflächige, periodische Strukturen zu erzeugen und sind somit von großer Bedeutung für die Herstellung eines periodischen Potentials, das im ersten Teil der Arbeit behandelt wird. Die Ergebnisse zu den Ordnungsphänomenen sind in Übereinstimmung mit experimentellen Befunden bezüglich Moleküladsorbaten auf Oberflächen ebenso wie superparamagnetischen Phasen in Systemen streufeldgekoppelter magnetischer Teilchen. Für die unbestätigten Rechnungen zu streufeldinduzierter Anisotropie werden Experimente vorgeschlagen, die den magneto-optischen Kerr Effekt nutzen.

Abstract

Potential theory is utilised to calculate the stray field and the stray field interaction of polarised (magnetised) particles. One aim is the optimisation of the geometry of periodic arrays to maximise the stray field and accordingly the stray field modulation. Patterned media with optimised stray field or stray field modulation are of general interest in basic research, *e.g.* to create molecule-traps or a periodic potential used in quantum optics or semiconductor physics, respectively. For different particle geometries and magnetisation directions one and two-dimensional lattices are investigated. Special attention is paid to geometries and length scales that are or will be experimentally relevant. As the interparticle interaction in dense packed systems cannot be neglected a formalism is developed that enables the analytical calculation of multipole moments and, therefore, the series expansion of the stray field interaction for a large class of particle shapes. The interaction of various multipole moments on two dimensional periodic and quasi periodic lattices is studied systematically by means of Monte Carlo methods. Apart from the Monopole moment the interaction of multipole moments shows a strong dependency on the orientation in space. As different moments prefer different relative orientations, this interaction may influence self-assembly of interacting particles. The multipole induced order phenomena and anisotropies are studied systematically. Self-organised particles play an important role in the fabrication of large periodic structures and, therefore, periodic potentials, which are discussed in the first part of this thesis. The calculated order phenomena are in agreement with experimental findings concerning molecule adsorbents on surfaces as well as superferromagnetic states in systems of stray field coupled ferromagnetic particles. To prove the so far unconfirmed stray field induced anisotropy calculations, experiments utilising the magneto-optic Kerr effect are suggested.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Theoretische Grundlagen | 5 |
| 2.1 | Potential und Streufeld eines magnetisierten Körpers | 6 |
| 2.1.1 | Exakte Formeln zur Berechnung des Streufeldes eines homogen magnetisierten Quaders | 7 |
| 2.1.2 | Exakte Formeln zur Berechnung des Streufeldes eines homogen magnetisierten Streifens mit rechteckigem Querschnitt | 8 |
| 2.2 | Reihenentwicklung eines periodischen Potentials | 9 |
| 2.3 | Wechselwirkung von Ladungsverteilungen in Fernfeldnäherung | 14 |
| 2.3.1 | Die Multipolentwicklung einer Ladungsverteilung | 14 |
| 2.3.2 | Die Reihenentwicklung der Wechselwirkung zweier Ladungsverteilungen | 16 |
| 2.3.3 | Tensortransformation von Kugelflächenfunktionen für Drehungen des Koordinatensystems | 17 |
| 3 | Maximierung des Streufeldes polarisierter Teilchen | 19 |
| 3.1 | Streufeldmaximierung in Magnetisierungsrichtung für ein einzelnes Teilchen | 20 |
| 3.2 | Streufeldmaximierung für homogen magnetisierte Streifen | 24 |
| 3.2.1 | Das Streufeld von Liniengittern mit homogener Quermagnetisierung in der Ebene | 24 |
| 3.2.2 | Das Streufeld von Liniengittern mit senkrechter, homogener Magnetisierung | 27 |
| 3.3 | Streufeldmaximierung für homogen magnetisierte Teilchen in zweidimensionalen Gittern | 29 |
| 3.3.1 | Streufeld des Quadratgitters mit homogener Magnetisierung in der Ebene | 30 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 3.3.2 | Das Streufeld des Schachbrettgitters mit homogener Magnetisierung in der Ebene | 32 |
| 3.3.3 | Vergleich der Streufelder von quadratischen Teilchen in Schachbrett- und Quadratanordnung bei homogen senkrechter Magnetisierung | 35 |
| 3.3.4 | Streufelder von Teilchenanordnungen mit dreizähliger Symmetrie | 37 |
| 4 | Fernfeldentwicklung der Streufeldwechselwirkung | 43 |
| 4.1 | Multipolmomente prismenförmiger Teilchen | 44 |
| 4.2 | Wechselwirkungsenergie zwischen beliebigen Multipolmomenten . . . | 52 |
| 5 | Multipolinduzierte Ordnung in 2dim. Gittern | 55 |
| 5.1 | Monte Carlo-Simulation | 56 |
| 5.1.1 | Die Funktionsweise des Simulationsprogramms | 56 |
| 5.1.2 | Simulation dipolgekoppelter Teilchen | 57 |
| 5.1.3 | Simulation quadrupolar gekoppelter Teilchen | 59 |
| 5.1.4 | Simulation oktopolar gekoppelter Teilchen | 64 |
| 5.1.5 | Simulation hexadekapolar gekoppelter Teilchen | 66 |
| 5.2 | Allgemeine Aussagen zu Ordnungsphänomenen in multipolar gekoppelten Systemen | 68 |
| 6 | Multipolinduzierte Anisotropie in 2dim. Gittern | 71 |
| 6.1 | Anisotrope Energie axialer Multipole | 72 |
| 6.2 | Symmetrieeigenschaften multipolinduzierter Anisotropie in 2dim. Gittern | 76 |
| 7 | Anisotropiemessungen mittels MOKE | 80 |
| 7.1 | Reflexionseigenschaften magnetischer Oberflächen | 81 |
| 7.2 | Funktionsweise des statischen, photometrischen Ellipsometers | 83 |
| 7.3 | Anisotropiebestimmung aus Hysteresekurven | 85 |
| 7.4 | Anisotropieberechnung aus winkelabhängiger Suszeptibilität | 86 |
| 7.4.1 | Iterationsverfahren zur Anisotropieberechnung für große Anisotropieenergien | 88 |
| 7.5 | Berechnung der z -Komponente der Magnetisierung | 90 |
| 7.6 | Besonderheiten des statischen Ellipsometers an Beispielen | 92 |
| 7.6.1 | Kerr-Messungen bei gleicher Größenordnung von Elliptizität und Analysatorwinkel ($\epsilon \lesssim \vartheta$ und $\theta \equiv 0$) | 93 |
| 7.6.2 | Der Einfluß einer großen Rotation auf die Messung der Elliptizität ($\epsilon \ll \vartheta$ und $\theta \lesssim \vartheta$) | 95 |
| 7.6.3 | Allgemeine Überlegungen zu Verzerrungen von Hysteresekurven | 96 |

| | |
|---|-------------|
| 7.6.4 Interpretation der Messung an Fe/Si(001) | 97 |
| Zusammenfassung und Ausblick | 103 |
| Literaturverzeichnis | 109 |
| Anhang | I |
| A Abkürzungen | I |
| B Liste der verwendeten Formelzeichen | II |
| C Äquivalenz von Elektro- und Magnetostatik | VI |
| D Mechanisches Modell zum Ferromagnetismus | VII |
| E Eigenschaften der Fourier-Transformation | XI |
| F Besselfunktionen J_n und Hankel-Transformationen \mathcal{H}_n | XIII |
| G Wesentliche Subroutinen des Monte Carlo-Programms | XV |
| G.1 Konstanten und Variablentypen | XVII |
| G.2 Erstellen der Momente aus eingelesenen Daten | XVIII |
| G.3 Rotieren von Multipolen in der vorgegebenen Datenstruktur | XXI |
| G.4 Paarwechselwirkungsenergie | XXIII |
| G.5 Berechnung der Gesamtenergie | XXV |
| G.6 <i>Wigner-D</i> -Funktion | XXVIII |

Kapitel 1

Einleitung

Seit der Entdeckung des Magnetit und der Erfindung der Kompaßnadel ca. 200 v. Chr. in China ist die Wirkung von Magnetismus ein ständiger Begleiter im Alltag, obwohl das Phänomen des Ferromagnetismus erst durch die Quantentheorie zweitausend Jahre später erklärt werden konnte. Heutzutage existieren unzählige Anwendungen, vom Haftmagneten bis zu magnetischen Speichermedien. War er bis vor kurzem noch ein Arbeitsgebiet für eine kleine Gruppe von Spezialisten, findet Ferromagnetismus in der modernen Forschung vielseitige Anwendungen bis hin zur Biophysik [1, 2]. Eine der aktuellen Verwendungen von Ferromagneten ist die Erzeugung permanenter periodischer Potentiale:

In der Halbleiterphysik werden Mikromagnete auf die Oberfläche eines Halbleiters aufgebracht. Dicht unter der Oberfläche befindet sich ein zweidimensionales Elektrogenas, das vom Streufeld der Magnete durchdrungen wird. In Transportmessungen als Funktion eines zusätzlichen äußeren, homogenen Magnetfeldes zeigen sich Widerstandsmodulationen als Folge der Kommensurabilität der Wellenfunktion der Elektronen mit dem periodischen Potential [3, 4]. Das Spektrum der quantenmechanischen Operatoren zeigt dann den sog. „Hofstadter-Schmetterling“, der fraktale Phänomene der Natur enthüllt [5]. Als Molekülfalle werden Mikromagnete in der Quantenoptik benutzt [6]. Es ist möglich, analog zur Photonenoptik eine Atom-Optik zu konstruieren. Mit Hilfe von Permanentmagneten können Wellenleiter, welche die de Broglie-Welle des Atoms führen, konstruiert werden [7]. Die periodische Anordnung im Gitter kann in der Atom-Optik als Spiegel oder tatsächlich als Interferenzgitter verwendet werden [8]. Bose-Einstein Kondensate in periodischen Fallen zeigen darüber hinaus angeregte Zustände [9–11]. Derart wechselwirkende Zustände bilden die Grundlage für Quantenalgorithmen und bieten somit eine Möglichkeit einen Quantencomputer zu realisieren [12, 13]. In diesem vergleichsweise jungen Forschungsbereich sind bei weitem noch nicht alle Möglichkeiten erkannt. Inwieweit strukturierte magnetische Materialien bei

der Entwicklung eines Quantencomputers eine Rolle spielen, wird die Zukunft zeigen. Nicht zuletzt ist es ein Ziel, die Speichertechnologie mittels strukturierter, magnetischer Materialien zu verbessern [14]. Technisch bleibt jedoch das Problem der Herstellung großflächiger, periodischer Nanostrukturen. Eine Möglichkeit bietet die Nanolithographie in Kombination mit Selbstorganisationsprozessen [15]. Interessant dabei ist eine kontrollierbare Wechselwirkung der Teilchen untereinander, welche die Selbstorganisation beeinflusst oder gar erst ermöglicht [16, 17].

In Anwendungen handelt es sich meist um Systeme mit einer großen Anzahl magnetischer Teilchen. Es ist somit nicht nur wichtig, die Physik des Einzelteilchens genau zu verstehen und diese zu kontrollieren, es müssen darüber hinaus auch das Verhalten des Kollektivs beschrieben und dessen Eigenschaften manipuliert werden. Zwei wichtige Fragestellungen betreffen dabei zum einen die Form und Stärke des Streufeldes von Gittern aus polarisierter Materie, zum anderen die Wechselwirkung polarisierter Teilchen untereinander.

Die Berechnung von Form und Stärke des Streufeldes ist ein klassisches Problem der Potentialtheorie. Lösungen für quasi eindimensionale elektrisch geladene Gitter sind bereits von Maxwell selbst berechnet worden [18]. Für klassische Dipole auf zweidimensionalen Gittern unterschiedlicher Symmetrie existieren Ergebnisse [19]. Für magnetische Körper mit endlicher Ausdehnung ist die Rechnung aufwendig. Das Potential eines rechteckigen Körpers wurde von Rhodes und Rowlands berechnet [20], die Ergebnisse lassen sich jedoch nur schwer oder gar nicht auf andere Geometrien anwenden. In unendlich ausgedehnten Gittern erlauben Fourier-Methoden die Berechnungen für alle Körper, deren Anordnung periodisch ist und deren Form eine analytische Fourier-Transformation zuläßt. Für die theoretische Berechnung der Selbstenergie magnetischer Filme mit periodischen Domänen gibt es systematische Herleitungen [21–24]. Diese Methoden lassen sich jedoch schlecht oder gar nicht auf das externe Streufeld verallgemeinern. Für das externe Streufeld sind nur Ansätze zu einer vollständigen Herleitung [25, 26] oder Lösungen für spezielle Geometrien [27] veröffentlicht. Die bekannten Lösungen werden teilweise genutzt, um die Streufelder experimenteller Strukturen zu berechnen [26]. Eine systematische Untersuchung unterschiedlicher Geometrien fehlt jedoch; die experimentell verwendeten Geometrien zum Erzeugen eines modulierten Potentials sind zum Teil nicht optimal [28]; zum Teil scheint die Bedeutung des Verhältnisses von Teilchengröße zu Gitterperiode gänzlich vernachlässigt zu werden und nur die Gitterperiode wird betrachtet [4]. Eine allumfassende Theorie zum Streufeld periodischer, magnetischer Strukturen, die alle möglichen Geometrien behandelt, kann auch im Rahmen dieser Arbeit nicht gegeben werden, doch werden die meisten, experimentell relevanten Geometrien systematisch untersucht.

Ebenso wie für die Streufelder sind auch für die Wechselwirkung magnetischer

Teilchen untereinander nur Lösungen für spezielle Geometrien veröffentlicht. Die Ergebnisse von Rhodes und Rowlands erlauben es, die Wechselwirkung homogener magnetisierter, rechteckiger Körper exakt zu berechnen. Andere Geometrien können i. A. jedoch nicht ausgewertet werden. Um die Wechselwirkungsenergie magnetischer Teilchen in periodischen Anordnungen zu berechnen, wird die Wechselwirkung oft in der Dipolnäherung behandelt, auch wenn das Verhältnis von Teilchenausdehnung zu Teilchenabstand eine derartige Näherung fragwürdig erscheinen läßt [29]. Nur für wenige, spezielle Geometrien wurden Korrekturen zur Dipol-Dipol-Wechselwirkung berechnet [30–32]. Aus diesem Grund wurde für die vorliegende Arbeit eine Methode entwickelt, die es für eine Vielzahl von Teilchenformen erlaubt, Korrekturterme bis zu beliebigen Ordnungen analytisch zu berechnen. Mittels dieser Multipolkorrekturen läßt sich sowohl das Feld eines einzelnen Teilchens als auch die Wechselwirkung zwischen Teilchen berechnen. Die präzise Kenntnis der Wechselwirkungsenergie ist erforderlich, um die thermische Stabilität von strukturierten, magnetischen Speichern [14] und auch dicht gepackten MRAM-Bauelementen [33] berechnen zu können. Der Energiebeitrag durch die Multipolmomente ist dabei i. A. anisotrop, d. h. er ist abhängig von der räumlichen Lage der Teilchen zueinander, ebenso wie von der Magnetisierungsrichtung des einzelnen Teilchens. Diese Winkelabhängigkeit beeinflusst die Ordnung des Grundzustandes wechselwirkender Teilchen und kann eine Anisotropie induzieren. Der Grundzustand dipolar gekoppelter Teilchen ist ausführlich untersucht [34–36]. Ordnungsphänomene, die mit den Korrekturtermen höherer Ordnung verknüpft sind, wurden jedoch nur anhand spezieller Probleme in der Chemie untersucht [37–39]. Eine Anisotropie als Folge der Korrekturterme ist zum Teil vermutet [40], zum Teil an speziellen Geometrien, angeordnet auf einem Rechteckgitter, untersucht worden [32, 41]. Eine geschlossene Behandlung der auftretenden Phänomene fehlt jedoch bisher; diese wird in der vorliegenden Arbeit gegeben.

Die Berechnung der Streufelder polarisierter Teilchen und Teilchenanordnungen wird in der Potentialtheorie behandelt. Eine Einführung in diese Thematik gibt Kapitel 2. Zunächst werden die notwendigen Herleitungen zur Berechnung des Streufeldes einzelner Teilchen eingeführt (Kap. 2.1). Um das Potential eines unendlich ausgedehnten Gitters zu berechnen, werden in Kapitel 2.2 die dazu notwendigen Fourier-Methoden behandelt. Befinden sich die wechselwirkenden Teilchen in großer Entfernung voneinander, so ist praktisch nur die Dipol-Dipol-Wechselwirkung zu berücksichtigen. Dieses gilt nicht mehr, wenn der Abstand der Teilchen klein gegen ihre Ausdehnung ist und die Form oder der präzise magnetische Zustand relevant werden. Aus diesem Grund wird in Kapitel 2.3 auf das Konzept der Fernfeldentwicklung eingegangen.

In Kapitel 3 werden Streufelder polarisierter Gitter hinsichtlich einer maximalen Feldmodulation untersucht. Eine optimale Feldmodulation verbessert die Möglichkeiten Kommensurabilitätseffekte in Magnetotransportmessungen zu beobachten ebenso wie die Effektivität atom-optischer Elemente gesteigert wird. Es werden sowohl eindimensionale wie auch zweidimensionale Gitter mit unterschiedlichen Symmetrien behandelt. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf Symmetrien, die experimentell einfach zu realisieren sind.

Um die Wechselwirkung von Teilchen untereinander zu studieren, wird in Kapitel 4 eine Methode zur Berechnung von Multipolmomenten axial magnetisierter, prismenförmiger Teilchen entwickelt und überprüft, inwieweit höhere Multipolwechselwirkungen zusätzlich zur Dipol-Dipol-Wechselwirkung zu berücksichtigen sind.

In Kapitel 5 werden Ordnungsphänomene untersucht, die ihren Ursprung in Multipolmomenten haben. Die Berechnung der Wechselwirkungsenergie von Multipolen in Kapitel 4 zeigt eine starke Abhängigkeit der Energie von der relativen Ausrichtung der Multipole. Dieses läßt bereits vermuten, daß die Ordnung in Selbstorganisationsprozessen durch die Wechselwirkung unterschiedlicher Multipolmomente beeinflusst werden kann. Wegen der Vielzahl an möglichen Multipolmomenten und denkbaren Gittersymmetrien beschränken sich die Rechnungen auf axiale Multipole und das Quadrat- und Dreieckgitter.

Die multipolinduzierte Ordnung zeigt bereits, daß abhängig von der zugrunde liegenden Gittersymmetrie, multipolbedingte Anisotropie auftritt. Um das Zusammenspiel zwischen der Symmetrie des Multipolmoments und der Symmetrie des Gitters zu untersuchen, wird in Kapitel 6 die anisotrope Energie von Momenten bis zu hoher Ordnung auf periodischen und quasiperiodischen Gittern berechnet.

Die Ergebnisse der Rechnungen zur multipolinduzierten Anisotropie lassen vermuten, daß diese Effekte auch meßbar sind. Aus diesem Grund wird in Kapitel 7 auf einen möglichen Nachweis mittels des magneto-optischen Kerr Effektes (MOKE) eingegangen. Die theoretischen Möglichkeiten werden erörtert und simuliert. Darüber hinaus wird auf einige Voruntersuchungen eingegangen, die Einschränkungen, aber auch neue Meßmöglichkeiten des MOKE aufgezeigt haben.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

Die Wechselwirkung zwischen magnetischen, makroskopischen Körpern wird im Rahmen der Magnetostatik, welche ein Spezialfall der Elektrodynamik ist, behandelt [42]. Sofern ein Magnetfeld seinen Ursprung nicht in freien Strömen \vec{J} sondern in der permanenten Magnetisierung eines Ferromagneten hat, kann das Feld \vec{H} und das dazugehörige Potential mit den Methoden der Magnetostatik behandelt werden¹. Für homogen magnetisierte Körper ist die Divergenz der Magnetisierung an der Oberfläche von Null verschieden, wenn der Normalenvektor eine Komponente parallel zur Magnetisierung hat. Diese Divergenz ist die Quelle eines Feldes und kann als magnetische Oberflächenladung interpretiert werden. Für inhomogen magnetisierte Materie ist die Divergenz auch im Volumen von Null verschieden. Die Folge sind Volumenladungen, die ebenfalls Quellen von Feldern sind. Der Zusammenhang zwischen den Quellen und den Potentialen bzw. Feldern wird dabei durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben [43].

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \vec{J} + \partial_t \vec{D} \\
 \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\partial_t \vec{B} \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{D} &= \rho \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

Auf der linken Seite der Gleichungen befinden sich die vektoriellen Ableitungen der Felder, des Magnetfeldes \vec{H} und des elektrischen Feldes \vec{E} sowie der Felder in Materie, der Verschiebungsstromdichte \vec{D} und der magnetischen Flußdichte \vec{B} . Auf der rechten

¹Wenn die freien Ströme die Topologie des Raumes nicht ändern, d. h. jeder geschlossene Weg ohne die Stromverteilung durchdringen zu müssen auf einen Punkt zusammengezogen werden kann, ist eine Formulierung des Magnetfeldes als Gradient eines skalaren Potentials möglich.

Seite der Gleichung 2.1 befinden sich die Quellen, die Stromdichte \vec{J} und die Ladungsdichte ρ , sowie der Einfluß zeitlich veränderter Felder (Induktion). Darüber lassen sich für die Felder (für Magnetfelder zumindest lokal) skalare Potentiale finden, so daß sich die Felder als negativer Gradient der Potentiale bestimmen lassen. In diesem Sinne definieren die Differentialgleichungen (2.1), wie aus den Quellen Potentiale und damit Felder zu berechnen sind.

2.1 Potential und Streufeld eines magnetisierten Körpers

Die Magnetisierung endlich ausgedehnter Körper führt bis auf Ausnahmen² zu magnetischen Oberflächen- und Volumenladungen. Die Oberflächenladung ρ_S und die Volumenladung ρ_V sind dabei definiert als

$$\begin{aligned}\rho_S &:= \mu_0 \vec{n} \cdot \vec{M} \\ \rho_V &:= -\mu_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{M}.\end{aligned}\quad (2.2)$$

Mit der Einführung der magnetischen Ladungen lassen sich die potentialtheoretischen Größen der Magnetostatik analog zur Elektrostatik bestimmen (s. Anhang C). Das Potential einer Ladungsverteilung $\rho(\vec{r})$ berechnet sich mittels der Greenfunktion

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\|\vec{x} - \vec{x}'\|}.\quad (2.3)$$

Mit dieser Definition ist das Potential einer beliebigen Ladungsverteilung

$$\Phi(\vec{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{\mu_0} \cdot G(\vec{r}, \vec{r}').\quad (2.4)$$

Mathematisch besteht das wesentliche Problem in der Integration über r^{-1} . Die ersten Arbeiten an rechteckigen Körpern gehen auf P. Rhodes und G. Rowlands [20] zurück. Für Ladungsverteilungen, die in kartesischen Koordinaten auf Flächen parallel zu den Koordinatenachsen konstant sind, vereinfacht sich das Problem. Es bleibt nur, alle Integrale der Funktion r^{-1} zu bestimmen. Definiert man den Integraloperator

$$D^{ijk}(f) = \int dx^i dy^j dz^k f,\quad (2.5)$$

²Als Gegenbeispiel sei der magnetisierte Torus genannt.

so sind mit

$$\begin{aligned} F_{000} &= \frac{1}{r} \\ F_{ijk} &= D^{ijk}(F_{000}) \end{aligned} \quad (2.6)$$

die Lösungen gegeben. Eine Liste der Funktionen F_{ijk} findet man in Ref. [44]³. Neben der planparallelen Ladungsverteilung setzt die Anwendbarkeit der Funktionen in Ref. [44] unabhängige Integralgrenzen voraus⁴. Folglich lassen sich rechteckige Ladungsverteilungen einfach berechnen, kreisförmige (hier sind die Integralgrenzen nicht-linear voneinander abhängig) jedoch nicht. Das Potential einer Ladungsverteilung erhält man durch eine dreifache Integration, während für die Wechselwirkung zweier Ladungsverteilungen ein Sechsfachintegral erforderlich ist. Das Feld \vec{H} der Ladungsverteilung ergibt sich aus dem Gradienten des Potentials Φ . Das Feld eines homogen magnetisierten Quaders kann einfach berechnet werden.

2.1.1 Exakte Formeln zur Berechnung des Streufeldes eines homogen magnetisierten Quaders

Gegeben sei ein Quader mit den Kantenlängen a , b und d jeweils in x , y und z -Richtung (s. Abb. 2.1). Die Magnetisierung zeige in x -Richtung, parallel zur Seite der Länge a . Um das Feld \vec{H} zu bestimmen, müssen zunächst die Integrale aus Ref. [44] sowie deren Gradienten berechnet werden. Das sehr unübersichtliche Ergebnis kann stark vereinfacht werden; dazu wird zunächst

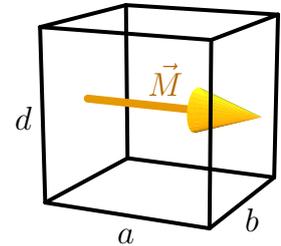


Abbildung 2.1: Skizze zum magnetisierten Quader.

$$\begin{aligned} \xi_i &= a + (-1)^i 2x, \\ \psi_i &= b + (-1)^i 2x, \\ \zeta_i &= d + (-1)^i 2x, \end{aligned} \quad (2.7)$$

kombiniert, mit $i \in \{0, 1\}$. Zusätzlich zu diesen Vereinfachungen mit $i, j, k \in \{0, 1\}$ definiert man

$$r_{ijk} = 2 \sqrt{\xi_i^2 + \psi_j^2 + \zeta_k^2} \quad (2.8)$$

und

$$\kappa_{ijk}^3 = \xi_i \cdot \psi_j \cdot \zeta_k. \quad (2.9)$$

³ In der vorliegenden ersten Ausgabe ist F_{200} nicht korrekt angegeben; es muß heißen $F_{200} = xL_x - r$.

⁴ Es ist zumindest erforderlich, daß eine lineare Koordinatentransformation existiert, welche zu unabhängigen Koordinaten führt.

Weiterhin ist es sinnvoll

$$\begin{aligned}
\Gamma_{ijk}^2 &= \frac{\kappa_{ijk}^3}{r_{ijk}}, \\
R_{ijk}^2 &= \xi_i^2 + \psi_j^2 + \zeta_k^2, \\
\alpha_{ij}^2 &= \xi_i^2 + \psi_j^2, \\
\gamma_{ij}^2 &= \zeta_i^2 + \xi_j^2, \\
\tau_{ij}^2 &= \psi_i \cdot \zeta_j
\end{aligned} \tag{2.10}$$

einzuführen. Diese Größen erlauben es, die Feldkomponenten in Einheiten der Sättigungsmagnetisierung M_S zu schreiben:

$$\begin{aligned}
-(\vec{H})_x &= (\vec{\nabla}\Phi)_x = \\
&= M_S \sum_{i,j,k \in \{0,1\}} \Gamma_{ijk}^2 \left(\frac{1}{\gamma_{ik}^2} + \frac{1}{\alpha_{ij}^2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\xi_i^2 + R_{ijk}^2}{\xi_i^2 \cdot r_{ijk}^2 + \tau_{jk}^4} + \arctan \frac{\Gamma_{ijk}^2}{\xi_i^2} \right)
\end{aligned} \tag{2.11}$$

$$\begin{aligned}
-(\vec{H})_y &= (\vec{\nabla}\Phi)_y = \\
&= M_S \sum_{i,j,k \in \{0,1\}} \nu_{ij} \cdot \operatorname{artanh} \frac{\zeta_k}{r_{ijk}}
\end{aligned} \tag{2.12}$$

$$\begin{aligned}
-(\vec{H})_z &= (\vec{\nabla}\Phi)_z = \\
&= M_S \sum_{i,j,k \in \{0,1\}} \nu_{ik} \cdot \operatorname{artanh} \frac{\psi_j}{r_{ijk}}.
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Dabei ist für $\nu_{ij} = (-1)^{i+j}$ zu setzen ist. Felder eines Quaders mit einer Magnetisierung in y- oder z-Richtung ergeben sich mittels einer Koordinatentransformation.

2.1.2 Exakte Formeln zur Berechnung des Streufeldes eines homogen magnetisierten Streifens mit rechteckigem Querschnitt

Neben Quadern endlicher Ausdehnung lassen sich analog auch die Felder von Streifen berechnen, die in einer Raumrichtung unendlich ausgedehnt sind und einen rechteckigen Querschnitt aufweisen.

Gegeben sei ein Streifen mit rechteckigem Querschnitt, unendlich ausgedehnt in die y -Richtung. Die Kantenlängen des Querschnitts seien a und d , jeweils in x und z -Richtung. Die Magnetisierung zeige in z -Richtung. Mit den Definitionen aus Kap. 2.1.1 berechnen sich die Feldkomponenten mittels

$$\begin{aligned} -(\vec{H})_x &= (\vec{\nabla}\Phi)_x = \\ &= M_S \sum_{i,j \in \{0,1\}} \frac{v_{ij}}{4\pi} \ln(\xi_i^2 + \zeta_j^2) \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} -(\vec{H})_z &= (\vec{\nabla}\Phi)_z = \\ &= M_S \sum_{i,j \in \{0,1\}} \frac{1}{2\pi} \arctan \frac{\xi_i}{\zeta_j}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Im Feld spiegelt sich der logarithmische Charakter des Potentials einer unendlich ausgedehnten Linienladung wider. Die logarithmischen Divergenzen gestatten es nicht, das Potential im Unendlichen Null zu setzen. Ebenso divergiert das Potential logarithmisch am Ort der Ladung. Diese Divergenz bedarf in konsistenten Theorien einer besonderen Beachtung im Falle einer Reihenentwicklung des Potentials, da in diesem Fall oft

$$\lim_{\|\vec{r}\| \rightarrow \infty} \Phi(\vec{r}) = 0 \quad (2.16)$$

herangezogen wird, um die Konvergenz einer Reihenentwicklung zu gewährleisten.

2.2 Reihenentwicklung eines periodischen Potentials

Ist das Potential eines einzelnen magnetischen Teilchens bekannt, so ergibt sich das Potential mehrerer Teilchen als Superposition; dieses gilt ebenso für die Felder. Handelt es sich jedoch um unendlich viele Teilchen, die in einer unendlich ausgedehnten Ebene angeordnet sind, ist die Berechnung des Potentials schwierig, da die Summe der Potentiale sowie der Felder i. A. sehr schlecht konvergiert. Sind die Teilchen jedoch periodisch angeordnet, so kann das Potential in einer Fourier-Reihe entwickelt und das Problem der schlechten Konvergenz in vielen Fällen vermieden werden. Die Fourier-Entwicklung eines periodischen Potentials findet unter anderem Anwendung in Physik, Geologie und Ozeanographie [25].

Die Fourier-Transformation einer Funktion $f(\vec{x})$ sowie ihre Inverse ist gegeben

durch⁵

$$\mathcal{F}(f(\vec{x}))(\vec{k}) \equiv \hat{f}(\vec{k}) := \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{x}) e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}} d\vec{x} \quad (2.17)$$

$$\mathcal{F}^{-1}(\hat{f}(\vec{k}))(\vec{x}) \equiv f(\vec{x}) := \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\vec{k}) e^{2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}} d\vec{k}. \quad (2.18)$$

Mit diesen Definitionen wird als Grundlage für alle periodischen magnetischen Potentiale das Potential eines einzelnen Dipols mit dem Moment \vec{m}

$$\Phi_{\text{dip}} = -\frac{1}{4\pi\mu_0} \vec{m} \cdot (\vec{\nabla}_P \cdot \frac{1}{\|\vec{r}\|}) \quad (2.19)$$

transformiert. Der Index P kennzeichnet dabei die Ableitung in bezug auf den Punkt \vec{P} in Abb. 2.2. Das magnetische Moment hat die Einheit **Vsm**, analog zum elektrischen Dipol als Produkt aus Ladung und Weg⁶. Das Potential hat demnach die Einheit **A**. Die zu erfüllende Aufgabe ist analog zur Bestimmung der Fourier-Transformation von $f(\|\vec{r}\|) = \|\vec{r}\|^{-1}$. Dieses folgt aus der Eigenschaft der Fourier-Transformation bezüglich Differentiation [45] (vgl. Anhang E). Die Entwicklung von $\|\vec{r}\|^{-1}$ in der Ebene, die \vec{P} enthält, ist

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}_{\text{dip}}(k_x, k_y, z) &:= \hat{\Phi}_{\text{dip}}(\vec{q}, z) = -\frac{1}{4\pi\mu_0} \mathcal{F}(m_x \partial_x \frac{1}{\|\vec{r}\|} + m_y \partial_y \frac{1}{\|\vec{r}\|} + m_z \partial_z \frac{1}{\|\vec{r}\|})(\vec{q}, z) \\ &= -\frac{1}{4\pi\mu_0} (2\pi i k_x m_x \mathcal{F}(\frac{1}{\|\vec{r}\|})(\vec{q}, z) + 2\pi i k_y m_y \mathcal{F}(\frac{1}{\|\vec{r}\|})(\vec{q}, z) \\ &\quad + m_z \partial_z \mathcal{F}(\frac{1}{\|\vec{r}\|})(\vec{q}, z)) \\ &= -\frac{1}{4\pi\mu_0} (2\pi i \vec{q} \cdot \vec{m}_{\parallel} \mathcal{F}(\frac{1}{\|\vec{r}\|})(\vec{q})) \\ &\quad + m_z \partial_z \mathcal{F}(\frac{1}{\|\vec{r}\|})(\vec{q}, z) \end{aligned} \quad (2.20)$$

und unabhängig von z . Dieses erlaubt das Ausklammern der Differentiation nach z im letzten Term (siehe Anhang E). Der Vektor \vec{m}_{\parallel} ist dabei die zweidimensionale Projektion des magnetischen Momentes auf die x - y -Ebene der Entwicklung, $\vec{m}_{\parallel} = (m_x, m_y)$. Es

⁵Es gibt mehrere Möglichkeiten die Fourier-Transformation zu definieren. Die unterschiedlichen Definitionen unterscheiden sich nur geringfügig. Der Vorteil dieser Definition ist insbesondere die Symmetrie von Transformation und inverser Transformation.

⁶Das Moment unterscheidet sich damit um die Einheiten von μ_0 von der üblichen Lehrbuchdefinition mit den Einheiten **Am²**, gemäß einem Ringstrom, dessen Moment sich aus dem Produkt von Strom und umschlossener Fläche ergibt; vgl. auch Anhang C.

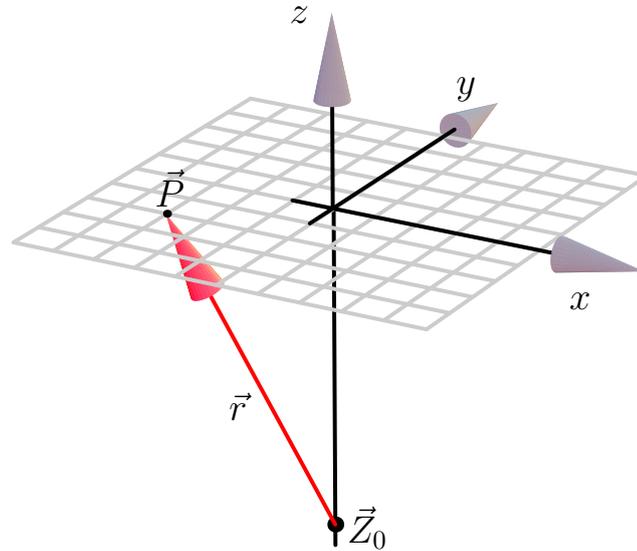


Abbildung 2.2: Skizze zur Geometrie bei der Fourier-Entwicklung eines Punktdipols am Ort \vec{Z}_0 . Die zweidimensionale Entwicklung gilt in der Ebene, in der sich auch der Punkt \vec{P} mit $\vec{P} - \vec{Z}_0 = \vec{r}$ befindet.

verbleibt die Berechnung der Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left(\frac{1}{\|\vec{r}\|}\right)(\vec{q}, z) &= \int_{\mathbb{R}^2} dx dy \frac{e^{2\pi i \vec{q} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty d\rho \frac{e^{2\pi i \|\vec{\rho}\| \cdot \|\vec{q}\| \cos(\varphi - \vartheta)}}{\sqrt{\|\vec{\rho}\|^2 + z^2}}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

wobei $\vec{\rho} = (x, y)$. Die Integration ist in Polarkoordinaten überführt. In diesen Koordinaten haben die Vektoren $\vec{\rho}$ und \vec{q} die Azimutalwinkel φ bzw. ϑ . Mit einer möglichen Definition der Besselfunktion (vergleiche Anhang F)

$$J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-iz \cos(\theta)} \quad (2.22)$$

wird die Fourier-Transformation, nach der Ausführung der Integration über φ , in eine Hankel-Transformation überführt

$$\mathcal{F}\left(\frac{1}{\|\vec{r}\|}\right)(\vec{q}, z) = 2\pi \int_0^\infty d\rho \frac{J_0(2\pi \|\vec{\rho}\| \cdot \|\vec{q}\|)}{\sqrt{\|\vec{\rho}\|^2 + z^2}}, \quad (2.23)$$

deren Lösung in Ref. [45] zu finden ist. Damit ist ($z < 0$)

$$\mathcal{F}\left(\frac{1}{\|\vec{r}\|}\right)(\vec{q}, z) = \frac{e^{2\pi \|\vec{q}\| z}}{\|\vec{q}\|} \quad (2.24)$$

und folglich mit

$$\begin{aligned}
\partial_z \mathcal{F}\left(\frac{1}{\|\vec{r}\|}\right)(\vec{q}, z) &= 2\pi e^{2\pi\|\vec{q}\|z} \\
\hat{\Phi}_{\text{dip}}(\vec{q}, z) &= -\frac{1}{4\pi\mu_0} (2\pi i \vec{q} \cdot \vec{m}_{\parallel} \frac{e^{2\pi\|\vec{q}\|z}}{\|\vec{q}\|} + m_z 2\pi e^{2\pi\|\vec{q}\|z}) \\
&= -\frac{2\pi}{4\pi\mu_0} \left(\frac{i\vec{q} \cdot \vec{m}_{\parallel}}{\|\vec{q}\|} + m_z \right) e^{2\pi\|\vec{q}\|z}. \tag{2.25}
\end{aligned}$$

Letztendlich wird noch die Fourier-Entwicklung $\hat{\Phi}_{\text{lin}}$ eines Liniendipols in z -Richtung am Ort ζ bestimmt. Hierzu wird über die z -Koordinate integriert:

$$\begin{aligned}
\hat{\Phi}_{\text{lin}}(\vec{q}, z) &= -\frac{2\pi}{4\pi\mu_0} \left(\frac{i\vec{q} \cdot \vec{m}_{\parallel}}{\|\vec{q}\|} + m_z \right) \int_{-h/2}^{h/2} d\zeta e^{2\pi\|\vec{q}\|(\zeta+z)} \\
&= -\frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{i\vec{q} \cdot \vec{m}'_{\parallel}}{\|\vec{q}\|} + m'_z \right) \frac{\sinh(\pi\|\vec{q}\|h)}{\pi\|\vec{q}\|h} e^{-2\pi\|\vec{q}\||z|}. \tag{2.26}
\end{aligned}$$

Dabei trägt $-|z|$ dem oben verlangten $z < 0$ Rechnung. Somit gilt die Lösungen für Ebenen oberhalb und unterhalb der Liniendipole (siehe Abb. 2.2). Der Übergang von m zu m' bedeutet, daß von nun an das Moment des Liniendipols angegeben wird. Dieses erfordert die Division durch die Länge h im Nenner des letzten Bruchs. Da die hyperbolische Funktion in Gl. 2.26 ebenfalls exponentiell mit den Argumenten wächst, ist eine Konvergenz bezüglich \vec{q} nur für $h < |z|$ möglich. Mit der Fourier-Entwicklung eines Liniendipols lassen sich beliebige laterale Verteilungen fester Dicke und Magnetisierungsrichtung berechnen. Wenn sich die laterale Verteilung durch eine Funktion $\Psi(x, y)$ mit den Perioden p_x und p_y beschreiben läßt und $\hat{\Psi}(\vec{q}) = \mathcal{F}(\Psi(x, y))(\vec{q})$ ist, dann läßt sich die Fourier-Transformation des Gesamtpotentials mittels des Faltungssatzes berechnen zu

$$\hat{\Phi}_{\text{ges}} = \hat{\Phi}_{\text{lin}} \cdot \hat{\Psi} \frac{1}{A}. \tag{2.27}$$

Die Oberfläche des einzelnen Teilchens ist A . Mit der Normierung $1/A$ ist in $\hat{\Phi}_{\text{lin}}$ für m' das Moment des Volumenteilchens anzugeben, und es ist

$$\Phi(x, y, z) = \sum_{\substack{n_1, n_2 \in \mathbb{Z} \\ \vec{q} = \left(\frac{n_1}{p_x}, \frac{n_2}{p_x}\right)}} \hat{\Phi}_{\text{ges}}(\vec{q}, z) \frac{e^{2\pi i(q_x x + q_y y)}}{p_x p_y}, \tag{2.28}$$

wobei die Verwandtschaft von Fourier-Entwicklung und Fourier-Reihe ausgenutzt wird. Die Koeffizienten der Fourier-Reihe sind durch die Fourier-Entwicklung, ausgewertet am entsprechenden k -Wert, gegeben. Diese müssen zusätzlich durch die Periode

dividiert werden, da die Koeffizienten der Reihe auf die Intervallbreite zu normieren sind.

Als Beispiel sei das Potential Φ_{\square} von quadratischen und Φ_{\circ} von kreisförmigen Teilchen der Kantenlänge a , bzw. des Radius r , angeführt. Die Unterseite der Teilchen liegt bei $z = -h/2$, die Oberseite bei $z = h/2$. Sind die magnetischen Körper auf einem Quadratgitter der Periode p angeordnet, so ist

$$\begin{aligned} \Phi_{\square}(x, y, z) = & \sum_{\substack{n_1, n_2 \in \mathbb{Z} \\ \vec{q} = (\frac{n_1}{p}, \frac{n_2}{p})}} - \frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{i\vec{q} \cdot \vec{m}_{\parallel}}{\|\vec{q}\|} + m_z \right) \frac{\sinh(\pi\|\vec{q}\|h)}{\pi\|\vec{q}\|} \cdot e^{-2\pi\|\vec{q}\||z|} \\ & \times \frac{\sin \pi q_x}{\pi q_x} \frac{\sin \pi a q_y}{\pi q_y} \cdot \frac{e^{2\pi i(q_x x + q_y y)}}{p^2} \cdot \frac{1}{a^2 h}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

sowie mit der Besselfunktion J_1 (Anhang F), die in der Fourier-Transformation der Kreisscheibe auftritt

$$\begin{aligned} \Phi_{\circ}(x, y, z) = & \sum_{\substack{n_1, n_2 \in \mathbb{Z} \\ \vec{q} = (\frac{n_1}{p}, \frac{n_2}{p})}} - \frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{i\vec{q} \cdot \vec{m}_{\parallel}}{\|\vec{q}\|} + m_z \right) \frac{\sinh(\pi\|\vec{q}\|h)}{\pi\|\vec{q}\|} \cdot e^{-2\pi\|\vec{q}\||z|} \\ & \times \frac{r J_1(2\pi r \|\vec{q}\|)}{\|\vec{q}\|} \cdot \frac{e^{2\pi i(q_x x + q_y y)}}{p^2} \cdot \frac{1}{\pi r^2 h}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Für diese Formeln sei daran erinnert, daß \vec{m} das Moment der magnetischen Teilchen ist. Dieses Moment skaliert mit der Ausdehnung der Teilchen [26]. Eine derartige Angabe der Reihe ist oft nicht praktikabel. Üblich ist die Vorgabe der Magnetisierung \vec{M} der Teilchen. Da in der Gl. 2.28 bereits implizit das magnetische Moment pro Volumen \vec{m}/V angegeben ist, kann dieses einfach durch die Magnetisierung $\mu_0 \vec{M} = \vec{m}/V$ ersetzt werden. Ein weiterer Vorteil dieser Darstellung ist, daß die oben eingeführten Normierungen entfallen und die üblichen Integrale für die Höhe der Teilchen und die Transformation der lateralen Struktur benutzt werden können. Die Beispielformeln ergeben sich dann zu

$$\begin{aligned} \Phi_{\square}(x, y, z) = & \sum_{\substack{n_1, n_2 \in \mathbb{Z} \\ \vec{q} = (\frac{n_1}{p}, \frac{n_2}{p})}} - \frac{1}{2} \left(\frac{i\vec{q} \cdot \vec{M}_{\parallel}}{\|\vec{q}\|} + M_z \right) \frac{\sinh(\pi\|\vec{q}\|h)}{\pi\|\vec{q}\|} \cdot e^{-2\pi\|\vec{q}\||z|} \\ & \times \frac{\sin \pi a q_x}{\pi q_x} \frac{\sin \pi a q_y}{\pi q_y} \cdot \frac{e^{2\pi i(q_x x + q_y y)}}{p^2}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

sowie für die kreisförmigen Teilchen

$$\Phi_{\circlearrowleft}(x, y, z) = \sum_{\substack{n_1, n_2 \in \mathbb{Z} \\ \vec{q} = (\frac{n_1}{p}, \frac{n_2}{p})}} - \frac{1}{2} \left(\frac{i\vec{q} \cdot \vec{M}_{\parallel}}{\|\vec{q}\|} + M_z \right) \frac{\sinh(\pi\|\vec{q}\|h)}{\pi\|\vec{q}\|} \cdot e^{-2\pi\|\vec{q}\||z|} \\ \times \frac{r \cdot J_1(2\pi r\|\vec{q}\|)}{\|\vec{q}\|} \cdot \frac{e^{2\pi i(q_x x + q_y y)}}{p^2}. \quad (2.32)$$

Es sind \vec{M}_{\parallel} und \vec{M}_z analog zu \vec{m}_{\parallel} und \vec{m}_z definiert.

In der Praxis ist noch zu bedenken, daß die Herleitung der Formel für $z < 0$ erfolgte. Als Konsequenz muß M_z in $-M_z$ übergehen, wenn $z > 0$ ist. Dieses spiegelt die Inversionssymmetrie wider. Wird diese Vorzeichenkonvention vernachlässigt, ändern sich die qualitativen Aussagen nicht; quantitativ kehrt sich z. B. bei Feldberechnungen die z -Komponente des Feldes um.

2.3 Wechselwirkung von Ladungsverteilungen in Fernfeldnäherung

Für eine beliebige Ladungsverteilung, die sich auf ein endliches Volumen V beschränkt, verschwindet der Einfluß der inneren Struktur auf das äußere Feld für große Entfernung. Existiert ein Ladungsüberschuß, so entspricht das Feld in großen Abständen dem einer Punktladung. Je kleiner der Abstand zu Ladungsverteilung ist, desto größer ist der Einfluß der inneren Struktur. Diese Tatsache macht man sich bei der Multipolentwicklung zunutze. Das Feld wird im Außenraum in eine Reihe zerlegt. Die Komplexität der Reihenelemente nimmt zu, während ihr Einfluß in großen Abständen abnimmt, so daß oft nur die ersten Elemente zu berücksichtigen sind. Die Multipol-Reihe konvergiert im Außenraum der Ladungsverteilung gegen die exakte Lösung des Potentials.

2.3.1 Die Multipolentwicklung einer Ladungsverteilung

Die Multipolentwicklung kann in beliebigen Koordinatensystemen durchgeführt werden; die häufigsten sind dabei kartesische und Kugelkoordinaten. Der Vorteil der kartesischen Entwicklung ist dabei die Beschränkung auf reelle Zahlen. Der Entwicklungsterm l -ter Ordnung ist ein Tensor l -ter Stufe. Die Anzahl unabhängiger Einträge in einem dreidimensionalen Tensor l -ter Stufe ist proportional l^2 . Rechnungen mit einer Ordnung mit $n > 2$ sind damit sehr aufwendig und unübersichtlich. In Kugelkoordinaten wird nach Kugelflächenfunktionen [46] entwickelt. Man nutzt die Tatsache, daß sich die Greenfunktion Gl. 2.3 nach Kugelflächenfunktionen entwickeln läßt [47]. Die

Kugelflächenfunktionen sind komplexe Tensoren l -ter Ordnung in Kugelkoordinaten, und die Anzahl der unabhängigen Einträge ist nur proportional l . Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit die Entwicklung in Kugelkoordinaten verwandt.

Das Multipolmoment Q_{lm} einer Ladungsverteilung $\rho(\vec{r})$ in Kugelkoordinaten ist definiert durch [48]

$$Q_{lm} = \int_V dV \rho(\vec{r}) R_{lm}(\vec{r}), \quad (2.33)$$

wobei die Integration über das Volumen V , das $\rho(\vec{r})$ einschließt, auszuführen ist. Das Integral ist gewichtet mit der normierten Kugelflächenfunktion R_{lm} [48] (siehe auch Gl. 2.36)

$$R_{lm}(\vec{r}) := \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2.34)$$

Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sind ein vollständiger Satz orthogonaler Funktionen auf der Einheitskugel [46]. Der Index l gibt die Ordnung an. Mit m , der sog. magnetischen Quantenzahl, werden die unabhängigen Komponenten des Tensors ($-l \leq m \leq l$) numeriert.

Das Potential einer Ladungsverteilung mit den Multipolmomenten Q_{lm} ist [48]

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\mu_0} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l I_{lm}(\vec{r}) Q_{lm}^*, \quad (2.35)$$

mit der zweiten normierten Kugelflächenfunktion

$$I_{lm}(\vec{r}) := \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \frac{Y_{lm}(\theta, \varphi)}{r^{l+1}}. \quad (2.36)$$

Q_{lm}^* ist die konjugiert komplexe Größe von Q_{lm} . Der Einfluß einer Multipolordnung l fällt somit in der Entfernung zur Potenz $-(l+1)$. Das Fernfeld ergibt sich dann aus dem negativen Gradienten des Potentials $\vec{F} = -\vec{\nabla}\Phi$.

Um die Eindeutigkeit der Entwicklung zu gewährleisten, legt man den Koordinatenursprung der Entwicklung in den Ladungsschwerpunkt

$$\vec{r}_s := \frac{\int_V dV \vec{r} |\rho(\vec{r})|}{\int_V dV |\rho(\vec{r})|}. \quad (2.37)$$

Es ist folglich $\vec{r}_s = 0$. Die verbleibenden Rotationsfreiheitsgerade werden durch die Tensortransformationseigenschaften der Kugelflächenfunktionen erfaßt (siehe Kap. 2.3.3).

2.3.2 Die Reihenentwicklung der Wechselwirkung zweier Ladungsverteilungen

Gegeben seien zwei Ladungsverteilungen A und B , deren Ladungsschwerpunkte durch den Vektor \vec{R}_{AB} verbunden wird. Die Multipolentwicklung basiert auf der Entwicklung des Terms $\|\vec{r} - \vec{r}'\|^{-1}$ nach Kugelflächenfunktionen und ergibt für die Ladungsverteilungen die Multipolmomente Q^A , bzw. Q^B . Ist die Wechselwirkung dieser Ladungsverteilungen zu bestimmen, ist die Entwicklung aufwendiger, da der Wechselwirkungsterm durch $\|\vec{R}_{AB} - (\vec{r}_A - \vec{r}_B)\|^{-1}$ bestimmt wird, wobei \vec{r}_A die Lage der Ladungen der Verteilung A auf den Ladungsschwerpunkt von A angibt (analog für B). Eine mögliche Entwicklung ist in Ref. [49] zu finden. Die angegebenen Methoden erlauben sogar die Entwicklung von sich durchdringenden Ladungsverteilungen. Nachteilig ist, daß die z -Koordinatenachse als parallel zu \vec{R}_{AB} vorausgesetzt wird. Eine aufwendigere, aber vom Koordinatensystem unabhängige, Methode wird in Ref. [50] benutzt. Die Wechselwirkungsenergie berechnet sich zu

$$E_{AB} = \frac{1}{4\pi\mu_0} \sum_{l_A l_B m_A m_B} T_{l_A l_B m_A m_B}(\vec{R}_{AB}) Q_{l_A m_A}^A Q_{l_B m_B}^B \quad (2.38)$$

mit dem geometrischen Tensor T [48]

$$\begin{aligned} T_{l_A l_B m_A m_B}(\vec{R}_{AB}) &= (-1)^{-l_A} \sqrt{\frac{(2l_A + 2l_B + 1)!}{(2l_A)!(2l_B)!}} \\ &\times \begin{pmatrix} l_A & l_B & l_A + l_B \\ m_A & m_B & -(m_A + m_B) \end{pmatrix} \\ &\times I_{l_A + l_B - (m_A + m_B)}(\vec{R}_{AB}). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Der Faktor in Klammern ist ein Wigner-3j Symbol [46]. Diese Faktoren treten bei der Kopplung von Drehimpulsen in der Quantenmechanik auf und sind in der expliziten Form oft sehr kompliziert. Der oben auftretende Spezialfall ist jedoch lösbar [46], und der Tensor kann vereinfacht werden:

$$\begin{aligned} T_{l_A l_B m_A m_B}(\vec{R}_{AB}) &= (-1)^{-l_B} I_{l_A + l_B m_A + m_B}^*(\vec{R}_{AB}) \\ &\times \sqrt{\frac{(l_A + l_B - m_A - m_B)!}{(l_A - m_A)!(l_B - m_B)!}} \\ &\times \sqrt{\frac{(l_A + l_B + m_A + m_B)!}{(l_A + m_A)!(l_B + m_B)!}}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Auf diese Weise kann schrittweise die Wechselwirkung zweier beliebiger Ladungsverteilungen approximiert werden.

2.3.3 Tensortransformation von Kugelflächenfunktionen für Drehungen des Koordinatensystems

Sind die Multipolmomente einer Ladungsverteilung zu berechnen, so existiert meist ein lokales Koordinatensystem, in dem die zu lösenden Integrale besonders einfach sind. Ist die Ladungsverteilung im lokalen Koordinatensystem symmetrisch, können auch einige Momente identisch Null sein. Weicht das lokale Koordinatensystem vom globalen ab, so sind die Momente und damit die Kugelflächenfunktionen zu transformieren. Da es sich bei den Kugelflächenfunktionen um ein vollständiges Orthonormalsystem von Tensoren in Kugelkoordinaten handelt, läßt sich die Transformationseigenschaft aus der Projektion eines Basisvektors $|Y_{ln}\rangle$ auf die rotierte Basis $|\widetilde{Y}_{lm}\rangle$ bestimmen, wobei hier der Klarheit halber die in der Quantenmechanik übliche Dirac-Schreibweise benutzt wird. Gesucht werden die Koeffizienten D_{nm}^l , für die gilt

$$|\widetilde{Y}_{lm}\rangle = \sum_n |Y_{ln}\rangle \langle Y_{ln} | \widetilde{Y}_{lm}\rangle =: \sum_n D_{nm}^l |Y_{ln}\rangle. \quad (2.41)$$

Bei der Transformation bleibt die Ordnung l des Tensors erhalten. $D_{nm}^l = D_{nm}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ ist dabei eine Funktion der Drehwinkel der Koordinatentransformation. Die Drehungen werden üblicherweise in Eulerwinkeln [51] (α, β, γ) angegeben. Die Wigner- D -Funktion $D_{nm}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ berechnet sich in Anlehnung an die Quantenmechanik mittels der quantenmechanischen Drehoperatoren, die Funktionen der Drehimpulsoperatoren \hat{J}_i bezüglich der Koordinatenachse i sind [52], gemäß

$$\begin{aligned} D_{nm}^l(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle Y_{ln} | \widetilde{Y}_{lm}\rangle \\ &= \langle Y_{ln} | e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma\hat{J}_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y} e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z} | Y_{lm}\rangle \\ &= e^{-i(m\alpha+n\gamma)} \langle Y_{ln} | e^{-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_y} | Y_{lm}\rangle \\ &= e^{-i(m\alpha+n\gamma)} d_{nm}^l(\beta). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Hierbei wurde ausgenutzt, daß die Kugelflächenfunktionen Eigenfunktionen zum Operator \hat{J}_z sind. Dieses ist für den Operator \hat{J}_y nicht der Fall, und der verbleibende Term $d_{nm}^l(\beta)$ ergibt sich nach Ref. [46] zu

$$\begin{aligned} d_{nm}^l(\beta) &= \sum_k (-1)^k \frac{(\cos \frac{\beta}{2})^{2k-m-n} \cdot (\sin \frac{\beta}{2})^{2l+m+n-2k}}{k!(l+m-k)!(l+n-k)!(k-m-n)!} \\ &\quad \times (-1)^{l+n} \sqrt{(l+m)!(l-m)!(l+n)!(l-n)!}, \end{aligned} \quad (2.43)$$

wobei die Summe über k derart zu wählen ist, daß kein Argument einer Fakultät negativ wird. Eine Umsetzung dieser Funktion als *C-Routine* befindet sich im Anhang G.6. Es

sind zwei Spezialfälle der *Wigner-D-Funktion* zu nennen.

$$\begin{aligned} D_{nm}^l(0, 0, 0) &= \delta_{n,m} \\ D_{nm}^l(0, \pi, 0) &= (-1)^{l+n} \delta_{n,-m}, \end{aligned} \tag{2.44}$$

dabei ist das Kronecker- δ $\delta_{i,j} = 1$ für $i = j$ und $\delta_{i,j} = 0$ für $i \neq j$.

Kapitel 3

Der Einfluß der Geometrie auf das Streufeld periodisch angeordneter polarisierter Teilchen

Neben der Grundlagenforschung an der Herstellung und den Eigenschaften magnetischer (oder ferroelektrischer) Teilchen, die sich allein durch Neugier begründen lassen sollte, finden magnetische Strukturen beispielsweise Anwendung in Spin-Elektronik-Bauelementen [53–55] oder als Molekülfallen in der Quantenoptik [7]. Magnetische und elektrische Strukturen werden genutzt, um den Einfluß eines periodischen Potentials auf den Magnetotransport innerhalb von zweidimensionalen Elektronengasen in Halbleitern zu untersuchen [3, 56]. In den beiden letzteren Fällen ist es fundamental, starke magnetische oder elektrische Felder zu erzeugen, um zum Beispiel im Halbleiter Hofstadter-Schmetterlinge [5, 57] beobachten zu können. Eine typische Aufgabe, in bezug auf die magnetischen Teilchen, ist dabei die Berechnung des Streufeldes einer bekannten Anordnung von Teilchen [26]. Da die Frage, ob für eine feste Größe und Geometrie eine ideale Anordnung oder bei fester Anordnung eine ideale Größe besteht, noch nicht systematisch untersucht wurde, soll diese Fragestellung in diesem Kapitel, mit einem Schwerpunkt auf experimentell relevanten Strukturen, behandelt werden. Ebenso werden für die Beispielrechnungen Längenskalen gewählt, die typischen experimentellen Längenskalen entsprechen. Für die rechteckigen Anordnungen ist eine Länge von 200 nm angenommen. Dieses entspricht der Wellenlänge eines ArF-Lasers, der in der Ultraviolett-Lithographie verwendet wird [58]. Im Gegensatz dazu werden die Perioden der sechszähligen Gitter zu ca. 40 nm gewählt. Dieses sind Abstände, die sich z. B. bei Selbstorganisationsprozessen mit Block-Kopolymeren einstellen [59]. Die Wahl von Längenskalen, die sich stark an experimentellen Größenordnungen orientieren, geht dabei auf Kosten des direkten Vergleichs von vier und sechszähligen

Anordnungen. Alle angegebenen Lösungen sind jedoch skaleninvariant, d. h. daß sich die Feldstärke nicht ändert, wenn alle Längen (die Kantenlängen der magnetischen Struktur und der Abstand, in dem das Feld bestimmt wird) in gleichem Maße skaliert werden.

Ist die Materie eines Festkörpers polarisiert, zum Beispiel durch Ferromagnetismus oder Ferroelektrizität, so ruft die Polarisation i. A. Felder hervor. Diese elektrischen oder magnetischen Felder werden außerhalb des Festkörpers als Streufeld, innerhalb als entpolarisierendes Feld¹ bezeichnet. Das Feld hat innerhalb des Körpers im Mittel keine Komponente in Polarisationsrichtung [60]. Im Falle der homogen magnetisierten Kugel ist es sogar vollständig antiparallel. Das entpolarisierende Feld \vec{H}_d kann die Selbstenergie E eines Körpers nur vergrößern. Der Beitrag zur Gesamtenergie durch das Feld \vec{H}_d eines Körpers mit der Magnetisierung \vec{M} ist

$$E_d = \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \vec{H} \cdot \vec{H} \, dV = -\frac{\mu_0}{2} \int_V \vec{M} \cdot \vec{H}_d \, dV, \quad (3.1)$$

dabei ist in dem Feld \vec{H} das Streufeld und das entmagnetisierende Feld zusammengefaßt. Um die Selbstenergie zu minimieren, ist es erforderlich das Feld \vec{H} zu minimieren. Die Ursache des Feldes sind Quellen, die durch die Magnetisierung entstehen, da im Allgemeinen $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} \neq 0$ gilt. Auf diese Weise entstehen Oberflächen- und Volumenladungen. Die Energie wird gemäß Gl. 3.1 minimal, wenn die Ladungen verschwinden, also $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ gilt. Dieses ist das sogenannte *Polvermeidungsprinzip* [61]. Das Polvermeidungsprinzip ist die Ursache für das Auftreten magnetischer (oder ferroelektrischer) Domänen. Die Magnetisierung ist eine Funktion des Ortes, welche im Idealfall Quellenfreiheit gewährleistet. Ein Konkurrenzterm zur Entmagnetisierungsenergie ist die Austauschenergie E_J . Diese Energie hat ihren Ursprung in der quantenmechanischen Vielteilchenwechselwirkung der Elektronen eines Festkörpers [62, 63]. Sind die polarisierten Teilchen hinreichend klein, liegen diese in einem eindomänigen Zustand oder, abhängig von der Geometrie, sogar homogen magnetisiert vor [64].

3.1 Streufeldmaximierung in Magnetisierungsrichtung für ein einzelnes Teilchen

Betrachtet man den sehr einfachen Fall eines ferromagnetischen Teilchens der Höhe h mit quadratischer Grundfläche der Kantenlänge a und der Magnetisierung senkrecht auf dieser Fläche, so ist dennoch nicht von vornherein klar, wie die Länge a zu wählen

¹Im Magnetismus wird dieses *entmagnetisierendes Feld* genannt.

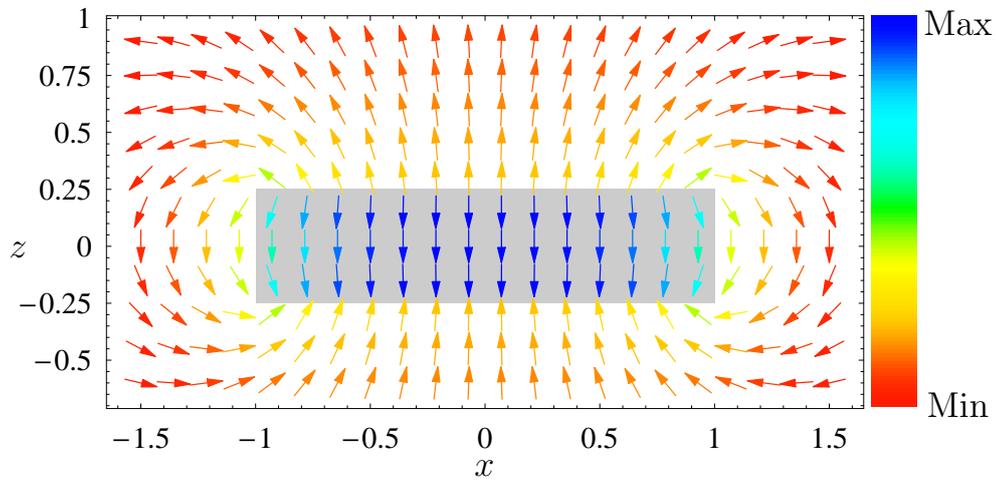


Abbildung 3.1: Das Streufeld eines Teilchens (graue Fläche) mit quadratischer Grundfläche der Kantenlänge a und Höhe $h = a/4$. Die Magnetisierung verläuft nach oben, entlang der z -Richtung. Die quantitativen Feldwerte sind für die qualitativen Aussagen ohne Bedeutung.

ist, um in einem Abstand d über dem Teilchen ein maximales Streufeld zu erhalten. Das Feld konvergiert offensichtlich gegen Null, wenn a verschwindet. Für $a = 0$ ist kein magnetisches Material vorhanden. Vergrößert man andererseits a , so divergiert das Feld nicht. Im Kontinuummodell macht sich die Polarisation der Materie in Form geladener Oberflächen bemerkbar. Betrachtet man den Fall $a \rightarrow \infty$, so ergeben sich zwei planparallele Flächen mit homogener aber entgegengesetzter Oberflächenladungsdichte. Aus den Stetigkeitsbedingungen der Maxwell-Gleichungen folgt, daß eine unendlich ausgedehnte Flächenladung ein homogenes Feld parallel zur Flächennormalen erzeugt. Die Felder beider Flächen addieren sich dabei im Außenraum zu Null. Das Analogon der Elektrostatik ist der unendlich ausgedehnte Plattenkondensator, der kein Streufeld aufweist. Da in beiden Grenzfällen kein Streufeld existiert, muß das Feld für eine endliche Ausdehnung des Teilchens maximal werden. Das Feld für endliches a läßt sich mit den Gln. 2.11-2.13 berechnen. Die Feldverteilung für ein einzelnes Teilchen ist im Querschnitt in Abb. 3.1 als Vektorfeld gezeigt. Es ist deutlich zu erkennen, daß das Streufeld kleiner als das entmagnetisierende Feld ist. Letzteres nimmt zum seitlichen Rand der Probe ab; gleichzeitig steigt das Streufeld dicht über der Probe zum Rand hin an. Diese Korrelation beruht auf der Tatsache, daß die Normalenkomponente des Feldes an der geladenen Grenzfläche um den Betrag der Sättigungsmagnetisierung der Probe springen muß. Während direkt über der Oberfläche der Probe das Feld im Zentrum kleiner als am seitlichen Rand ist, gilt dieses für größere Abstände nicht mehr. Dicht über der Mitte der Oberfläche zeigt die z -Komponente des Magnetfeldes ein lo-

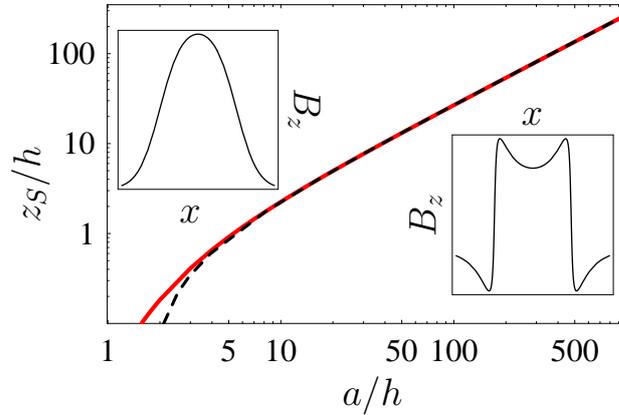


Abbildung 3.2: Charakteristischer Abstand z_S für das Auftreten von Kanteneffekten bei einer quadratischen Struktur mit senkrechter Magnetisierung. Der Abstand z_S (—) und die Kantenlänge a sind in Einheiten der Höhe h angegeben. Der Verlauf der z -Komponente des Feldes ist für $z \geq z_S$ als Graph eingefügt. Näherung von z_S für $a > 5h$ durch $z_S/h = 0.27a/h - 0.50$ (---).

kales Minimum², während in großen Abständen das globale Maximum mittig zu finden ist. Es existiert folglich ein Abstand, in dem die z -Komponente des Magnetfeldes einen Sattelpunkt aufweist. Die Lage z_S dieses Sattelpunktes ist in Abb. 3.2 als Funktion der lateralen Ausdehnung a berechnet. Für $z < z_S$ befinden sich am Rand der Struktur Überschwinger in der z -Komponente des Magnetfeldes (s. eingefügte Graphen Abb. 3.2). Diese sind für $z > z_S$ verschwunden. Für $a > 5h$ kann der Abstand z_S des Sattelpunktes gut durch die Funktion $z_S/h = 0.27a/h - 0.50$ beschrieben werden. Rechnungen für einen senkrecht magnetisierten Streifen führen zu fast identischen Ergebnissen, nur ist hier die Steigung der Näherungsfunktion 0.29. Die relative Feldverteilung in einer Ebene parallel zur Oberfläche hängt von der Entfernung dieser Ebene zur Oberfläche ab. Dieses bedeutet, daß die ideale Ausdehnung a davon abhängt, in welcher Entfernung z von der Oberfläche das Feld maximiert werden soll. Im Folgenden wird das Feld entlang der z -Richtung über dem Zentrum des Teilchens untersucht. Auf dieser Linie ist aus Symmetriegründen nur die z -Komponente des Feldes von Null verschieden. Entlang dieser Achse vereinfacht sich Gl. 2.11 zu

$$\vec{H}_z = - \frac{\arctan \frac{a^2}{(h-2z)\sqrt{2a^2+(h-2z)^2}} + \arctan \frac{a^2}{(h+2z)\sqrt{2a^2+(h+2z)^2}}}{\pi} \quad (3.2)$$

²Die Angabe „lokal“ (wie im Folgenden auch „global“) bezieht sich dabei auf die 2dim. Ebene parallel zur Oberfläche der magnetischen Struktur. Im 3dim. Raum handelt es sich nicht um ein Minimum.

Die anderen Feldkomponenten sind identisch Null. Für $z > d$ ist das Argument der ersten Arkustangensfunktion negativ. Da $|h-2z|^{-1} > |h+2z|^{-1}$ ist, dominiert der erste Term und das Feld ist positiv. Die unterschiedlichen Vorzeichen beider Terme führen ebenfalls dazu, daß im Fernfeld die niedrigste Ordnung in z^{-1} verschwindet und das Feld, als Dipolnäherung, proportional z^{-3} ist. Für kleine Kantenlängen a wächst das Feld quadratisch mit a , da die Ladung der Fläche mit a^2 steigt. Der Vorfaktor der Parabel ist dabei, wie in Abb. 3.3, eine Funktion der Höhe h der magnetischen Struktur sowie vom Abstand z über der Oberfläche, in dem das Feld bestimmt wird. Das asymptotische Verhalten für große Kantenlängen a ist dagegen unabhängig von z und verläuft proportional a^{-1} . Die optimale Ausdehnung ist abhängig von der Entfernung z , in der das Feld maximiert werden soll. Je dichter der zu optimierende Punkt an der Probe liegt, je kleiner also z , desto kleiner die ideale Probengröße und desto schärfer ist das Maximum. Ist der Quader mit quadratischer Grundfläche in der Ebene magnetisiert, ergeben sich praktisch die gleichen Kurven, jedoch mit geringeren Feldwerten.

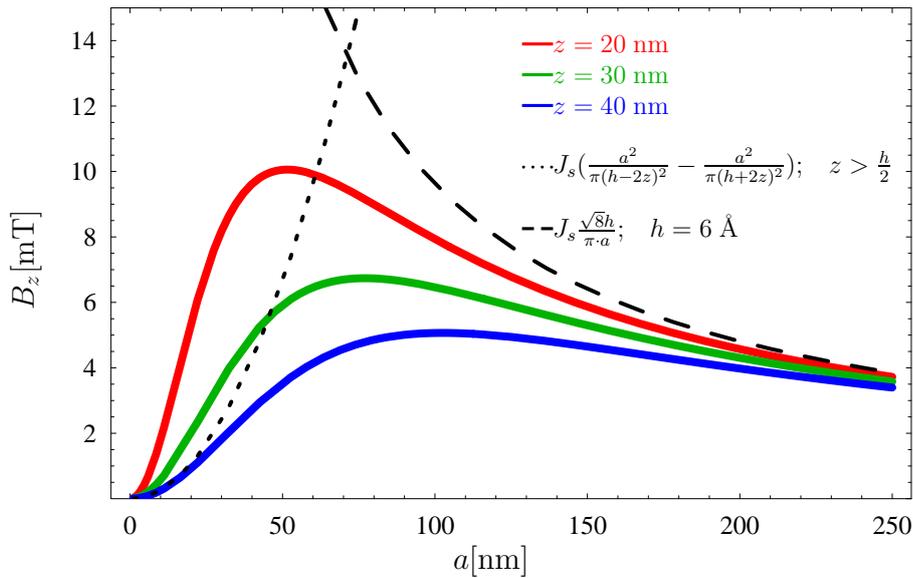


Abbildung 3.3: Das Streufeld eines Kobaltteilchens mit quadratischer Grundfläche der Kantenlänge a und der Dicke $h = 6 \text{ \AA}$ senkrecht über dem Teilchen für drei verschiedene Abstände d (Kobalt weist bei 6 \AA in Co/Pt Mehrfachschichten eine senkrechte Magnetisierung auf [65]). Nur die z -Komponente des Feldes ist von Null verschieden. Die Sättigungsmagnetisierung von Kobalt als dreidimensionaler Festkörper ist bei 20° C $\mu_0 M_S = 1.78 \text{ T}$ [66]; bei 6 \AA dicken Filmen sind bereits über 90% dieses Wertes erreicht, wobei die genauen Zahlen vom Substrat abhängen [67–69].

3.2 Streufeldmaximierung für homogen magnetisierte Streifen

Quasi eindimensionale Strukturen sind eine einfache Möglichkeit ein periodisches Potential zu erzeugen. Im Falle eines elektrischen Potentials lassen sich Streifen besonders leicht am Rand kontaktieren. Magnetische Strukturen lassen sich ebenfalls in Form von Streifen herstellen (lithographisch oder durch Maskentechniken).

Das Koordinatensystem, in dem diese Geometrie beschrieben wird, liege derart, daß die Streifen in y -Richtung unendlich ausgedehnt sind. Für die Magnetisierung verbleiben die zwei anderen Raumrichtungen als nicht-triviale Orientierung. Da es für ein moduliertes Potential im Falle des Magnetotransportes ausschließlich auf die z -Komponente des Feldes ankommt, werden die weiteren Komponenten im Folgenden außer acht gelassen. Die y -Komponente ist für diese Geometrie identisch Null. Das Feld eines einzelnen Streifens kann exakt berechnet werden. Um das Feld einer periodischen Anordnung von Streifen zu berechnen, bedient man sich Fourier-Methoden analog zu Kap. 2.2.

3.2.1 Das Streufeld von Liniengittern mit homogener Quermagnetisierung in der Ebene

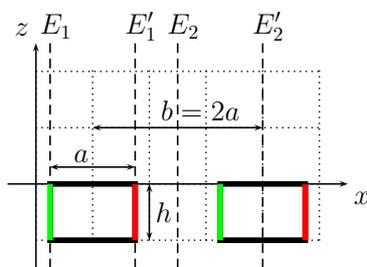


Abbildung 3.4: Geometrie der Streifengitter. Die magnetischen Strukturen sind senkrecht zur Zeichenebene unendlich ausgedehnt. Die Ebenen E_1 und E_2 sind Symmetrieebenen.

Bereits ohne Rechnung ist die optimale Anordnung von Streifen mit rechteckigem Querschnitt und einer Magnetisierung in der Ebene klar, wenn die z -Komponente des Feldes maximiert werden soll. Ohne das magnetische Material an sich zu betrachten, reduziere man das Problem auf abwechselnd positiv und negativ geladene senkrecht stehende Platten. Sind die Streifen genauso breit wie die Abstände zwischen ihnen, so sind alle Platten äquidistant angeordnet. Diese Geometrie besitzt zwei unterschiedliche Spiegelsymmetrieebenen. Die erste Ebene E_1 (Abb. 3.4), in der auch die magnetische Oberflächenladung liegt, weist eine positive Parität bezüglich der Ladung auf. Eine

Spiegelung an der Ebene E_2 hat negative Parität. Die y - z -Ebene in der Mitte eines Streifens (E'_2 , Abb. 3.4) ist dann äquivalent zu der y - z -Ebene, die sich mittig zwischen zwei Streifen befindet (E_2 , Abb. 3.4). Mit einem Vorzeichenwechsel in der Magnetisierung sind auch die Ebenen E_1 und E'_1 äquivalent. Folglich befindet sich innerhalb der ersten

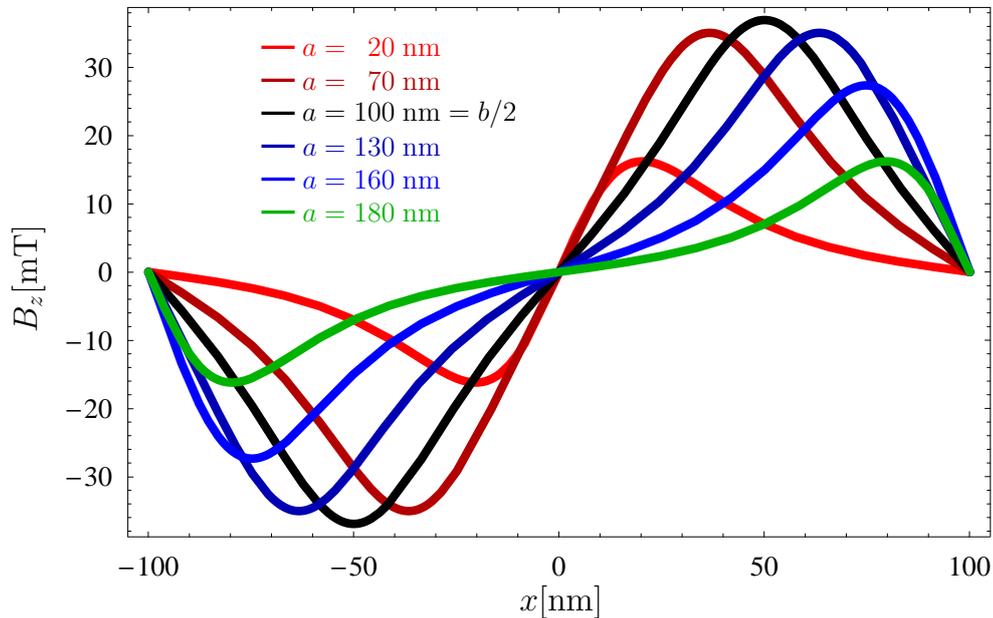


Abbildung 3.5: z -Komponente des Feldes einer periodischen Streifenanordnung. Die Periode der Anordnung beträgt $b = 200$ nm. Die Mitte der Streifen liegt jeweils bei $x = kb$ ($k \in \mathbb{Z}$). Die Magnetisierung liegt in der Ebene. Die Werte für B_z gelten für Kobalt-Streifen der Dicke 5 nm in einem Abstand von 30 nm. Die maximale Feldmodulation erhält man für $2a = b$. Wenn die Streifenbreite von dieser idealen Konfiguration abweicht, sind die resultierenden Kurven bei gleicher Abnahme wie Zunahme der Breite äquivalent (*rot* und *grün* sowie *dunkelrot* und *dunkelblau*).

Symmetrieebene ein Nulldurchgang der z -Komponente des Feldes, während sich in der zweiten die Extrema befinden müssen. In diesem Bild ist es äquivalent, ob die Streifen oder die Zwischenräume verbreitert werden. Das Resultat ist in jedem Fall, daß zwei entgegengesetzt geladene Platten einander angenähert werden. Das Feld dieser Platten kompensiert sich und der extremale Feldwert muß zwangsläufig dem Betrage nach sinken. Die ideale Geometrie ist also gegeben, wenn die Periode b der Streifen die zweifache Streifenbreite a ist. Dieser und weitere Fälle mit $b \neq 2 \cdot a$ sind in Abb. 3.5 berechnet. Die ideale Geometrie für Streifen mit Magnetisierung in der Ebene ist offensichtlich $b = 2a$. Es verbleibt die Frage nach der optimalen Periode b . Die Feldmodulation in einem festen Abstand z variiert mit der Periode b derart, daß die Modulation $\Delta B_z = B_{z,\max} - B_{z,\min}$ streng monoton mit b steigt, bei festem Verhältnis $b = 2a$. Je größer die Periode gewählt wird, desto größer ist die Feldmodulation. Wie in Abb. 3.6 deutlich wird, ist der Zusammenhang nicht linear: In einem festen Abstand z_0 fällt die Modulation exponentiell, wenn die Periode eine charakteristische Länge b_0 , mit $b_0 < 2z_0$,

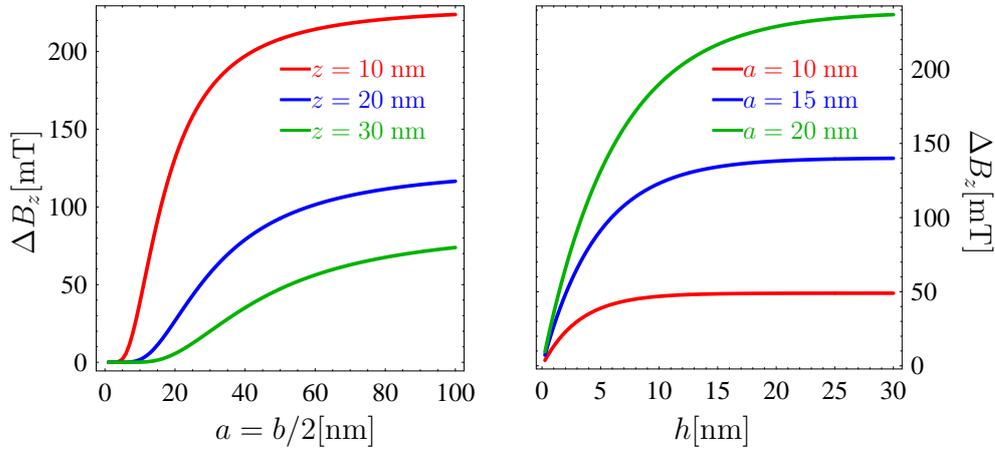


Abbildung 3.6: Feldmodulation $\Delta B_z = B_{z,\max} - B_{z,\min}$ für $h = 5$ nm hohe Streifen als Funktion der Breite $a = b/2$ für drei verschiedene Abstände z (links). Rechts ist die Modulation als Funktion der Streifenhöhe für drei verschiedene Breiten $a = b/2$ aufgetragen ($z = 10$ nm).

unterschreitet. Für sehr kleine Perioden sind alle z derart groß, daß das Feld durch das Fernfeld des Streifengitters gegeben ist. Für eine Magnetisierung in der Ebene verschwindet das Fernfeld des Gitters und somit auch die Modulation. Gemäß Gl. 2.26 und Gl. 2.28 fällt die n -te Ordnung der Entwicklung im Außenraum mit $B_z \propto e^{-\lambda_n z}$ und $\lambda_n = 2\pi n/k_{x,y}$. Die charakteristische Länge ist also durch die Periode der Streifen gegeben. Für große Perioden konvergiert das Feld gegen die Lösung eines einzelnen Streifens. Bezüglich der Höhe steigt die Modulation zunächst linear und sättigt dann. Die Sättigung setzt genau dann ein, wenn die Entfernung zwischen dem Ort der Modulation und der Rückseite der Streifen die Größenordnung der charakteristischen Länge erreicht, also $z + h > a$.

Ist es Ziel, durch Streifen mit einer Magnetisierung in der Ebene in einem festen Abstand z eine möglichst starke Feldmodulation zu erzeugen, so sind zusammenfassend folgende drei Dinge zu beachten, bzw. zu bemerken. Die Breite a der Streifen ist derart zu wählen, daß sie der Hälfte der Periode des Gitters entspricht. Die Periode b des Gitters darf nicht wesentlich kleiner sein als der Abstand z . Um die Modulation zu steigern, kann die Höhe h der Streifen vergrößert werden, jedoch liefern Höhen, die deutlich größer als die Breite sind, maximal also ein quadratischer Querschnitt, kaum Verbesserungen.

3.2.2 Das Streufeld von Gittern mit senkrechter, homogener Magnetisierung

Im Gegensatz zu einer Magnetisierung in der Ebene lassen sich die Eigenschaften bei senkrechter Magnetisierung nicht vollständig durch Symmetrieüberlegungen herleiten. Analog ist jedoch, wie zuvor, die y - z -Ebene, welche durch die Mitte eines Streifens verläuft, sowie die Ebene mittig zwischen zwei Streifen, eine Symmetrieebene. Die Magnetisierung zeigt bezüglich beider Ebenen positive Parität. Innerhalb dieser Ebenen liegt also gewiß ein Extremum der Feldstärke. Dieses Extremum ist jedoch nicht notwendig das globale Extremum. Verdeutlicht wird diese Tatsache in Abb. 3.7. Ist also die maximale Feldamplitude $\Delta B_z/2$ gesucht, so muß berücksichtigt werden, daß die Lage der globalen Extrema mit dem Abstand z vom Gitter, der Höhe h der Streifen und dem Verhältnis Breite zu Periode a/b variiert. Für eine 5 nm dicke Kobaltprobe sind offensichtlich Überschwinger in B_z im Nahfeld zu beobachten. Zwar wird der Feldstärkenverlauf symmetrisch für $b = 2a$, doch weicht die Lage der globalen Extrema für kleine z von den Symmetriepunkten ab. Es ist nicht notwendig, daß die

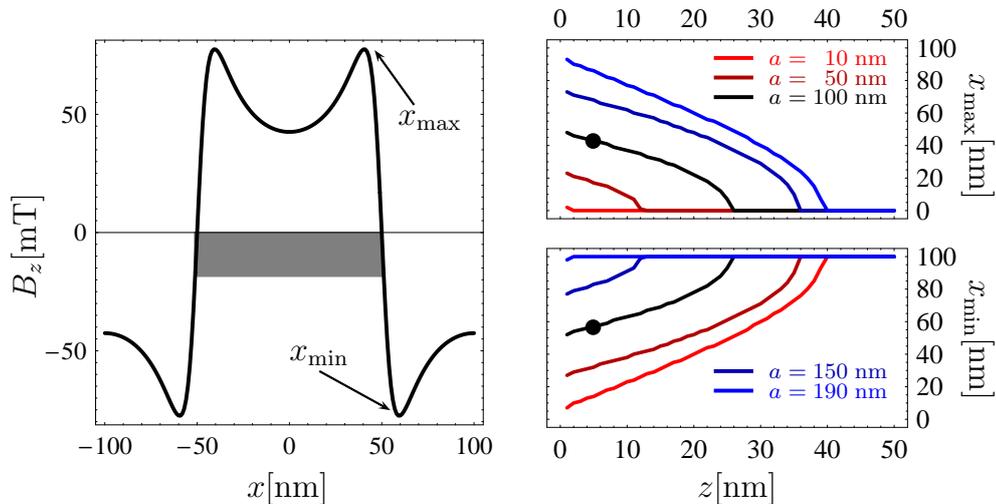


Abbildung 3.7: Die z -Komponente des Feldes über 5 nm dicken 100 nm breiten Streifen mit einer Periode von 200 nm. Das Feld wurde für einen Abstand von 7 nm berechnet. Die quantitativen Angaben gelten für Kobalt. Am Rand treten deutliche Feldüberhöhungen auf, die bereits in Abb. 3.1 zu erkennen sind. Die globalen Feldextrema liegen nicht in einer Symmetrie-Ebene (s. Text). Die Lage der Extrema ist vom Abstand z , in dem das Feld bestimmt wird, abhängig. Die Position x_{\min} und x_{\max} des Minimums und Maximums sind in den rechten Graphen als Funktion des Abstandes z für unterschiedliche Streifenbreiten a bei gleicher Periode b aufgetragen (die Werte, welche zum linken Graphen gehören, sind als \bullet markiert). Alle Streifen haben eine Höhe von 5 nm.

symmetrische Füllung des Gitters eine maximale Feldmodulation ergibt. Dieser Sachverhalt ist in Abb. 3.8 dargestellt. Wenn im Fernfeld die Überschwinger verschwunden sind, ergibt das symmetrische Gitter die maximale Amplitude. Je dichter jedoch z am Gitter liegt, desto kleiner ist die optimale Streifenbreite. Die Modulation wird im Nahfeldbereich durch den Feldsprung an der Kante des Streifens bestimmt. Je kleiner der Einfluß benachbarter Streifen, desto größer ist die Modulation. Dieses begünstigt möglichst schmale Streifen. Dem entgegen wirkt die Tatsache, daß ein Streifen der Breite $a = 0$ nm kein Feld erzeugt. Im Grenzwert von $z \rightarrow 0$ sollte aber auch $a \rightarrow 0$ laufen. In diesem Fall liegen Minimum und Maximum des Feldes sehr dicht beieinander. Die Frequenzen aus der Fourier-Entwicklung, welche zu der steilen Flanke zwischen den Extrema führen (vgl. Abb. 3.7 links), sind deutlich größer als die Grundfrequenz, die durch die Periode des Gitters bestimmt ist. In diesem Sinne handelt es sich um eine hochfrequente Modulation. Der Überschwinger ist eine Folge der anders geladenen Rückseite des Streifens. In der Mitte kompensiert das Feld der Rückseite das vorderseitige Feld maximal. Am Rand nimmt der Einfluß der Rückseite aus Symmetriegründen ab. Je kleiner die Höhe der Streifen ist, desto stärker wird das Feld kompensiert. Wie bereits an Abb. 3.2 zu erkennen ist, nimmt die Höhe des Feldüberschwingers ab, wenn die Höhe der Streifen zunimmt. Aus dem gleichen Grund wächst mit der Höhe der Streifen ebenfalls die Feldstärke über den Streifen und somit auch die Feldmodulation. Wie bereits in Kap. 3.2.1 gezeigt wurde, fallen die Feldstärke und damit auch die Modulation exponentiell mit der Entfernung. Die charakteristische Länge des Abfalls ist

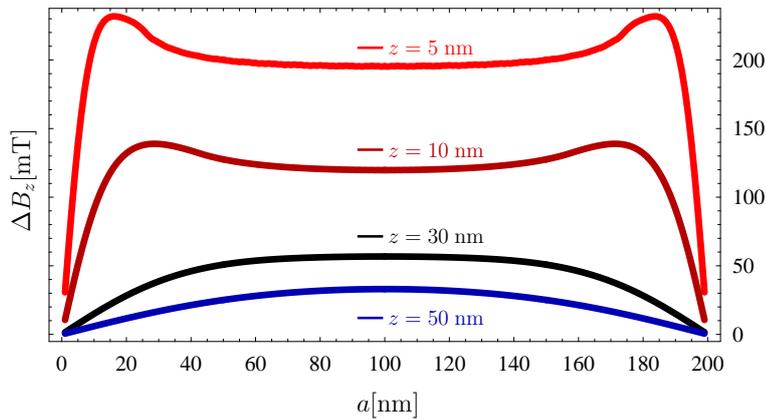


Abbildung 3.8: Maximale Feldmodulation ΔB_z als der Funktion Streifenbreite a . Die Periode beträgt $b = 200$ nm, die Höhe der Streifen ist $h = 5$ nm. Im Fernfeld ergibt sich die maximale Modulation für die symmetrische Anordnung $b = 2a$. Im Nahfeld werden kleinere Breiten begünstigt. Dieses ist eine Folge der Feldüberhöhung am Rand der Streifen für kleine Abstände z .

durch die Gitterperiode gegeben.

Bei der Streufeldmaximierung senkrecht magnetisierter Streifen ist der Parameter-
raum größer als für Streifen mit einer Magnetisierung in der Ebene. Gemein ist beiden
Systemen, daß sowohl die Feldstärke als auch die Modulation mit der Streifendicke zu-
nimmt, wobei sich die Fälle im Sättigungsverhalten voneinander unterscheiden. Die
charakteristische Abklinglänge des Feldes ist jeweils durch die Gitterperiode gege-
ben. Für senkrecht magnetisierte Streifen treten Überschwinger in der z -Komponente
des Feldes auf, so daß die größtmögliche Feldmodulation nicht notwendig durch ein
hochsymmetrisches Gitter erzeugt wird. Durch die Wahl der Entfernung z , die Höhe
der Streifen h sowie das Verhältnis von Breite zu Periode hat man Einfluß auf die
Überschwinger und kann somit gezielt den Beitrag hochfrequenter Terme in der Feld-
modulation steuern.

3.3 Streufeldmaximierung für homogen magnetisierte Teilchen in zweidimensionalen Gittern

Ergänzt man die eindimensionale Strukturierung aus dem vorherigen Abschnitt um ei-
ne weitere Dimension, so vergrößert sich der Parameterraum. Die Periodizität kann
in x -Richtung (b_x) und in y -Richtung (b_y) unterschiedlich sein. Ebenso kann sich der
Füllfaktor in beiden Richtungen, also die Ausdehnung der Teilchen a_x und a_y relativ
zur jeweiligen Periode, unterscheiden. Die Teilchen können verschiedene Formen auf-
weisen, zum Beispiel rechteckig oder zylindrisch sein. Des weiteren gibt es mehrere
periodische Anordnungen. Die bekanntesten sind die einfache und die zentrierte qua-
dratische sowie die dreieckige Anordnung (siehe Abb. 3.9). Das einfache Quadratgitter
geht für $a_y \rightarrow b_y$ in ein Streifengitter über. Die Periode des zentrierten Gitters ist derart
definiert, daß es für $b_x = b_y = 2a_x = 2a_y$ in ein Schachbrettmuster übergeht. Das Qua-
dratgitter läßt sich sehr einfach herstellen. Eine Herstellungsmethode ist das Metallbe-
dampfen eines Substrates durch ein Gitter. Es ergibt sich ebenfalls ein Quadratgitter,
wenn zwei 90° gegeneinander gedrehte Streifenmuster in eine magnetische Schicht ge-
schrieben werden. Das Streifenmuster kann mittels optischer Interferenzlithographie,
ein sog. paralleles Verfahren, realisiert werden. Mit Hilfe eines fokussierten Ionen-
strahls³, ein serielles Verfahren, lassen sich beliebige Strukturen schreiben [70, 71]. Mit
beiden Methoden lassen sich Schachbrettmuster und Dreieckgitter herstellen. Dreieck-
gitter lassen sich darüber hinaus auch mittels Selbstorganisierter Strukturen erzeugen
[15, 72]. In vielen Fällen ordnen sich dabei kugelförmige Teilchen auf einer Oberfläche
in sechszähliger, dichtester Packung an.

³FIB *focused ion beam*

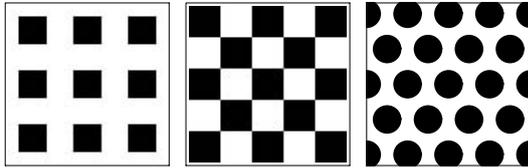


Abbildung 3.9: Skizze von zweidimensionalen Gittern. Das Rechteckgitter links, das Schachbrettmuster (zentriertes Rechteckgitter) in der Mitte sowie die hexagonale Anordnung rechts.

Obwohl deutlich mehr Parameter zu berücksichtigen sind als bei Streifen, gelten die grundsätzlichen Überlegungen aus den vorherigen Abschnitten auch für zweidimensionale Anordnungen. So lassen sich z. B. für rechteckige Teilchen mit einer Magnetisierung in der Ebene die gleichen Symmetrieüberlegungen wie bei Streifen anführen und eine symmetrische Anordnung in Richtung der Magnetisierung maximiert das Streufeld. Für senkrecht magnetisierte Teilchen tritt, wie auch bei den Streifen, eine Kantenüberhöhung in der Feldstärke auf, wenn die laterale Ausdehnung deutlich größer als die Höhe der Teilchen ist. Ebenso gelten die Argumente über die ideale Strukturgröße, die sich auf das Fernfeld des Gitters begründen. Für zweidimensionale Anordnung ist aber die zusätzliche Periodizität in der zweiten Raumrichtung zu berücksichtigen. Dieses soll im Folgenden für das Rechteckgitter, das zentrierte Gitter sowie verschiedene Gitter mit dreizähliger Symmetrie diskutiert werden. Wie bereits bei den Liniengittern wird auch im Folgenden die z -Komponente des Feldes maximiert, da nur diese in Magnetotransportmessungen von Bedeutung ist.

3.3.1 Streufeld des Quadratgitters mit homogener Magnetisierung in der Ebene

Bei dem in diesem Abschnitt betrachteten Gitter soll die Magnetisierung immer in der Ebene entlang der x -Richtung liegen. In diesem Fall (und im analogen Fall mit der Magnetisierung in y -Richtung) zeigt die Magnetisierung zum nächsten Nachbarn. Bezüglich der Streufeldkopplung ergibt sich so in einer Reihe ein energetisch günstiger Zustand. Wie in Kap. 5 gezeigt wird, ist eine parallel ausgerichtete Nachbarkette im Falle von Dipol-Dipol-Wechselwirkung mit Korrekturen durch Oktopolkomponenten im Quadratgitter allerdings nur metastabil. Antiparallele Ketten wären energetisch am günstigsten⁴. Die z -Komponente des Feldes für Quadratgitter ist in Abb. 3.10 dargestellt. Die stärkste Modulation findet man über den Teilchen entlang der x -Richtung, parallel zur Magnetisierung. Die Feldmodulation in y -Richtung ist deutlich schwächer. Auf den Geraden mit der Bedingung $x = kb_x$ bzw. $y = (k + 1/2)b_y$, mit $k \in \mathbb{Z}$ ist die Mo-

⁴Antiparallele Ketten lassen sich mit der zugrundeliegenden Theorie und den verwendeten Algorithmen als Superposition zweier entgegengesetzt magnetisierter Rechteckgitter berechnen.

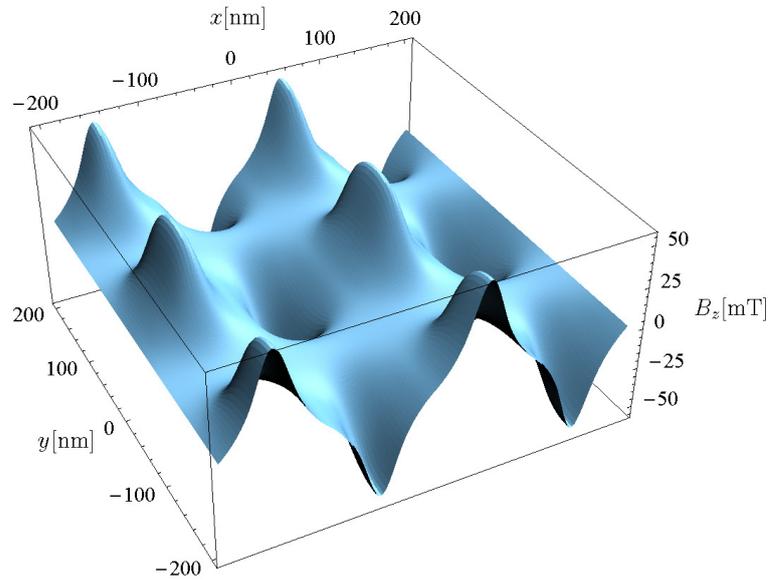


Abbildung 3.10: z -Komponente des Magnetfeldes quadratischer Teilchen der Kantenlänge $a = 100$ nm und der Höhe $h = 5$ nm. Die Teilchen sind auf einem Quadratgitter der Periode $b = 200$ nm angeordnet. Die Magnetisierung verläuft in der Ebene in x -Richtung. Die maximale z -Komponente in einem Abstand von 20 nm befindet sich an der Grenzfläche der Einzelstruktur.

dulation Null. Die Modulation in x -Richtung auf der Geraden $y = 0$ nm ist vergleichbar zu derjenigen bei den Streifen. Obwohl die Modulation in y -Richtung schwächer als in x -Richtung ist, ergibt die symmetrische quadratische Anordnung das Maximum (die

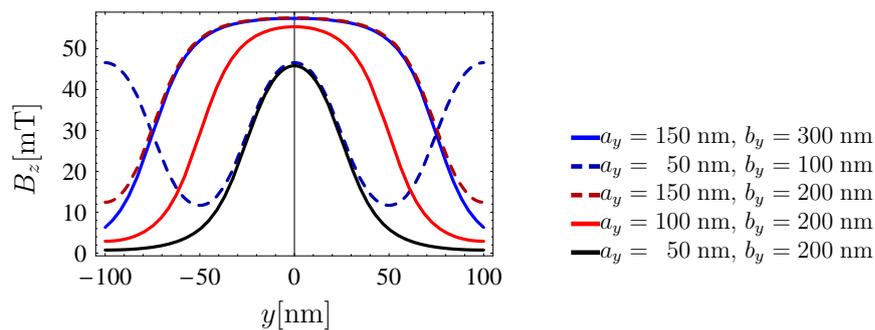


Abbildung 3.11: z -Komponente des Magnetfeldes für ein Rechteckgitter entlang der y -Richtung mit der Magnetisierung in x -Richtung. Das Feld wird für den Abstand $z = 20$ nm berechnet. Die 5 nm dicken Kobaltteilchen haben eine Kantenlänge von $a_x = 100$ nm. Die Kantenlänge a_y sowie die Periode b_y wird variiert. b_x beträgt 200 nm. Die Werte wurden auf der Geraden $x = 50$ nm berechnet.

rote Kurve in Abb. 3.11). Abgesehen von der blauen Kurve in Abb. 3.11 verringern alle Variationen von a_y und b_y die Modulationsamplitude. Im zuletzt genannten Fall wird gleichermaßen a_y und b_y vergrößert. Dieses Vorgehen widerspricht der Zielsetzung der Feldmaximierung bei kleiner bzw. fest vorgegebener Periode. Der maximale Feldwert ist dabei im Grenzwert die Lösung des Einzelteilchens. Zwischen zwei Teilchen fällt das Feld auf Null ab. Im Außenraum fällt das Feld und somit auch die Modulation exponentiell. Wie in Abb. 3.12 zu sehen ist, nimmt die Modulation entlang der y -Richtung dabei schneller ab, als diejenige in x -Richtung. Mit zunehmender Höhe der Teilchen wächst die Modulation. Sie sättigt analog zu den Rechnungen für Streifen, wenn die Höhe in die Größenordnung der lateralen Ausdehnung gelangt, also nur noch Fernfeldkorrekturen hinzukommen.

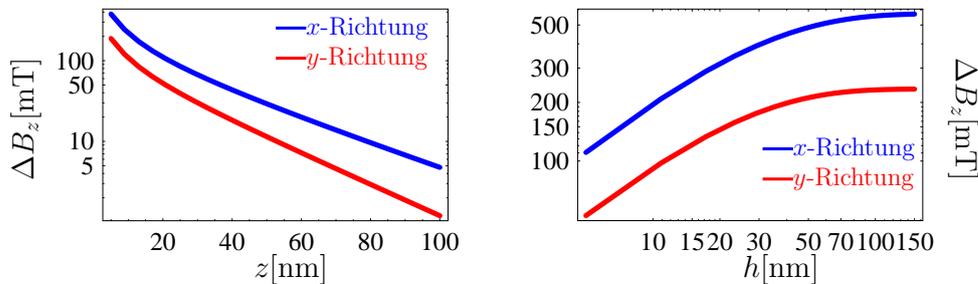


Abbildung 3.12: Maximale Feldmodulation im Quadratgitter in x -Richtung (—) und in y -Richtung (—). Es ist $a_x = a_y = 100$ nm und $b_x = b_y = 200$ nm. Im linken Graph beträgt die Höhe der Kobaltteilchen $h = 5$ nm. Der Abstand im rechten Graph ist $z = 20$ nm.

3.3.2 Das Streufeld des Schachbrettgitters mit homogener Magnetisierung in der Ebene

Das ideale zentrierte Gitter ist für eine Magnetisierung in x -Richtung durch das Schachbrettmuster mit $2a = b$ gegeben. Dieses Muster hat in x - wie in y -Richtung nicht nur die gleiche Periodizität, sondern auch die gleiche Feldmodulation. Für geringe Abstände z von der Probe ist der Feldverlauf in die beiden senkrechten Raumrichtungen unterschiedlich. Dieser Unterschied verschwindet aber für größere Abstände, da der Feldverlauf zunehmend sinoidal wird⁵.

Komplizierter ist das Ergebnis, wenn die Teilchen diagonal in der Ebene, in Richtung des nächsten Nachbarn, magnetisiert sind. In diesem Fall bietet es sich an, ein gedrehtes Koordinatensystem zu verwenden mit $\xi = (x + y)/\sqrt{2}$ und $\eta = (y - x)/\sqrt{2}$.

⁵Es sei daran erinnert, daß der Einfluß einer Fourier-Komponente mit dem Abstand z umso schneller fällt, je größer der Betrag des Wellenvektors \vec{q} ist.

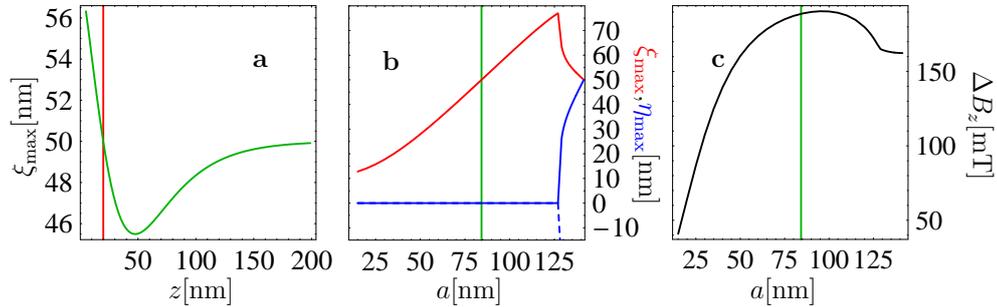


Abbildung 3.13:

(a): Lage des Extremums der z -Komponente des Feldes für 5 nm hohe Kobaltquadrate der Kantenlänge $a = 84.25$ nm in zentrierter quadratischer Anordnung. Die Gitterperiode beträgt $b = 200\sqrt{2}$ nm (damit ist die magnetische Periode identisch mit derjenigen bei Magnetisierung in x -Richtung und $b = 200$ nm). Im Grenzwert kleiner z liegt das Extremum bei $\xi = 59.6$ nm (s. Text), im Grenzwert großer z bei $\xi = 50$ nm.

(b): Position der extremalen B_z -Komponente als Funktion der Kantenlänge a für $z = 20$ nm. Die anderen Parameter sind gleich zu denen aus (a). Bis zu $a_0 = 128$ nm liegt das Extremum auf der Geraden $\eta = 0$. Für $a > a_0$ treten zwei Extrema auf deren beider Lage durch den blauen und den roten Kurvenast gegeben sind. Die Position der Extrema ergibt sich, wenn zu einem festen Wert a die Werte vom blauen und roten Kurvenast zu einem Paar (ξ, η) kombiniert werden. Das zweite Extremum liegt symmetrisch zu ξ -Achse, hat also negative η -Werte.

(c): Maximale Feldmodulation als Funktion der Kantenlänge a in einem Abstand $z = 20$ nm.

Ist die Periode groß im Vergleich zur Ausdehnung der Teilchen, so liegt die extremale z -Komponente des Feldes für kleine Abstände z direkt über der Ecke der Einzelstruktur. Für größere Abstände glättet sich die Feldverteilung und die Extrema verlagern sich derart, daß schließlich eine symmetrische Verteilung entsteht. Dieses Verhalten ist in Abb. 3.13 (a) berechnet. Das Extremum liegt aus Symmetriegründen auf der Geraden $\eta = 0$. Mit steigendem Abstand z wandern die Positionen der Extrema derart, daß sich im Grenzwert großer Abstände ein symmetrisches Verhalten einstellt: die Abstände zwischen den Extrema werden gleich groß⁶. Bezüglich der Ausdehnung der Struktur sei noch erwähnt, daß dieses einzelne Extremum nicht bis zum Grenzfall $2a = b$ existiert. Die diagonale Magnetisierung kann als Superposition zweier Lösungen mit einer Magnetisierung entlang der Achsen aufgefaßt werden. Das ideale Schachbrettmuster mit einer Magnetisierung entlang der Hauptachse hat das Extremum der B_z -Komponente aus Symmetriegründen mittig über der Seitenfläche. Die

⁶Für einen einzelnen Dipol in x -Richtung liegt die extremale z -Komponente des Feldes im Fernfeld auf der Geraden $x = \pm 2z$ bei $y = 0$. Die Lage divergiert mit z .

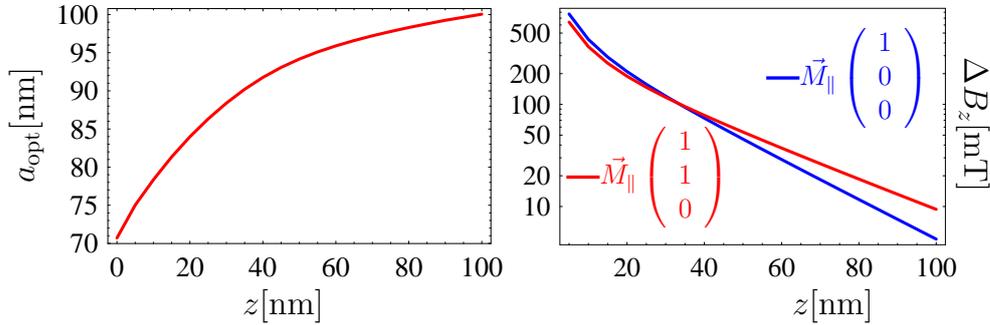


Abbildung 3.14: Die optimale Strukturgröße a_{opt} für quadratische Strukturen in einem zentrierten Gitter mit $b = 200\sqrt{2}$ als Funktion des Abstandes z für diagonale Magnetisierung in der Ebene (links). Rechts als Funktion des Abstandes z ein Vergleich der Modulation einer diagonal magnetisierten Struktur optimaler Kantenlänge mit der Modulation des idealen Schachbrettmusters mit Magnetisierung in x -Richtung und einer Periode $b = 200$ nm; damit betragen die magnetische Perioden in beiden Fällen 200 nm. Die Höhe der Teilchen ist $h = 5$ nm. Die Feldmodulation des idealen Schachbrettmusters mit Magnetisierung in x -Richtung ist für kleine Abstände z größer, fällt aber für große Werte von z schneller mit z .

Superposition zweier Gitter mit senkrecht zueinander stehender Magnetisierung ändert nichts an der Lage der zwei Extrema. Dies bedeutet, daß für einen festen Abstand z_0 eine Strukturgröße a_0 existiert, für die das Extremum zu einem Sattelpunkt wird und sich für $a > a_0$ zwei Extrema bilden, die sich mit wachsendem a in Richtung der Seitenflächenmitten verlagern. Für die Parameter aus Abb. 3.13 beträgt die kritische Größe etwa $a_0 = 128$ nm. In Abb 3.13 (b) weicht von diesem Punkt an die Kurve für η von Null ab.

Strukturen mit diagonaler Magnetisierung zeigen ein komplexes Verhalten. Sicher ist jedoch, daß zu einem festen Abstand z_0 eine Kantenlänge a_0 existiert, für die eine Feldmodulation der Periode $b/\sqrt{2}$ vorliegt (Abb. 3.14, links). In diesem Fall ist die Feldmodulation auf der Geraden $\eta = kb/\sqrt{2}$, mit $k \in \mathbb{Z}$, hochsymmetrisch. Gleichzeitig findet man senkrecht auf der Geraden $\xi = b/\sqrt{8}(k + 1/2)$ nm eine symmetrische Modulation mit gleicher Periodizität aber nur etwa halber Amplitude. Die Gerade $\xi = b/\sqrt{8}k$ ist frei von Modulation. Diese Geraden sind als Linien konstanter Stärke in Abb. 3.15 (a) zu erkennen. In der Graphik 3.15 (b) ist zum Vergleich das maximal gefüllte Schachbrett dargestellt. Die Extrema liegen mittig auf den Kanten der Strukturen. Die Modulationsperiode ist identisch b , aber der Hub ist mit $\Delta B_z = 162.4$ mT kleiner als im Fall Abb. 3.15 (a) mit $\Delta B_z = 188.8$ mT. Diagonale Ketten sind als Folge der Streufeldwechselwirkung energetisch begünstigt und lassen

sich mit großer Stabilität durch Aufmagnetisieren realisieren. Eine Schachbrettfigur mit einer Magnetisierung in x -Richtung kann zum Beispiel durch die Kristallanisotropie des magnetischen Materials stabilisiert werden. Ebenso kann ein externes Feld in der Ebene angelegt werden, um diese Ausrichtung der Magnetisierung zu unterstützen. In Abb. 3.14 (rechts) ist zu erkennen, daß für kleine Abstände z das ideale Schachbrett mit einer Magnetisierung in x -Richtung eine größere Modulation aufweist als Strukturen mit diagonaler Magnetisierung (in ξ -Richtung). Da für die gleiche magnetische Periode eine kleinere Gitterperiode erforderlich ist, nimmt das Feld im Außenraum schneller mit dem Abstand ab. In einem Abstand von 10 nm, mit den Strukturparametern aus Abb. 3.14, wird allerdings eine größere Modulation (120%) erreicht. Darüber hinaus ist bei einer Magnetisierung in x - wie in y -Richtung dieselbe Feldmodulation zu finden.

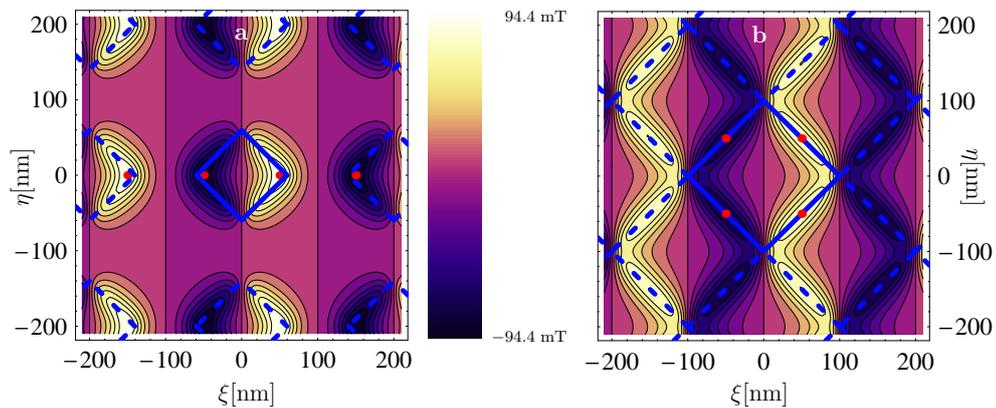


Abbildung 3.15: Quadratische Teilchen der Höhe $h = 5$ nm in zentrierter Anordnung mit einer Periode von $b = 200\sqrt{2}$ nm. Die Magnetisierung liegt in ξ -Richtung. In (a) ist die optimale Strukturgröße von $a = 84,25$ nm in (b) $a = 100\sqrt{2}$ nm gewählt. Die z -Komponente des Feldes ist in einem Abstand $z = 20$ nm berechnet. Die blauen Rechtecke kennzeichnen die Lage der magnetischen Struktur, die roten Punkte die Lage der Extrema.

3.3.3 Vergleich der Streufelder von quadratischen Teilchen in Schachbrett- und Quadratanordnung bei homogen senkrechter Magnetisierung

Wie bereits zuvor erwähnt, ist für flache Teilchen mit senkrechter Magnetisierung eine Kantenüberhöhung der Feldstärke zu beobachten. Der Einfachheit halber sei deshalb im

Folgendes die Teilchenhöhe h oder der Abstand z derart groß, daß keine Kanteneffekte auftreten bzw. diese sehr klein sind.

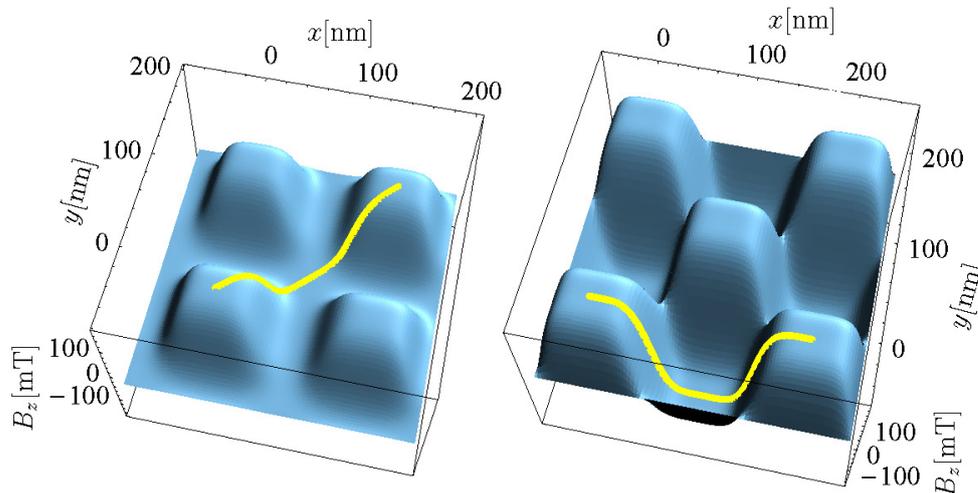


Abbildung 3.16: Quadratische Teilchen der Höhe $h = 10$ nm in einfacher und zentrierter quadratischer Anordnung. Die z -Komponente des Feldes, welches seinen Ursprung in einer senkrechten Magnetisierung hat, ist in einem Abstand $z = 20$ nm berechnet. Die Periode des Quadratgitters ist $b = \sqrt{2} \cdot 100$ nm, die des Schachbrettgitters $b = 200$ nm. Für diese Gitterperioden ist die Periodizität der maximalen Feldmodulation, gekennzeichnet durch die gelbe Linie, in beiden Fällen 200 nm.

Um das Schachbrett und das Quadratgitter miteinander vergleichen zu können, wird die Strukturperiode b jeweils derart gewählt, daß die resultierende magnetische Periode identisch ist. Dieser Fall ist in Abb. 3.16 dargestellt. Die maximale Modulation für das zentrierte Gitter ergibt sich, wenn die Fläche zu 50% gefüllt und das ideale Schachbrettmuster realisiert ist. Im Gegensatz zum zentrierten Gitter, das höchstens eine halbe Füllung erlaubt, kann die Füllung beim Quadratgitter zwischen 0% und 100% variieren, wobei in beiden Extremfällen das Streufeld identisch Null ist. Die optimale Füllung hängt von der Höhe h und dem Abstand z ab. Diese Abhängigkeit und ein Vergleich mit dem Schachbrett sind in Abb. 3.17 berechnet. Im Fall von $h = 5$ nm und $z = 20$ nm sind bereits Einflüsse der Kantenüberhöhung zu erkennen. Die ideale Strukturgröße wird durch die grünen Graphen (für die beiden Höhen h), welche die Position der Maxima als Funktion des Abstandes z in den Kurvenscharen von Abb. 3.17 angeben, angezeigt. Unabhängig von der Höhe strebt a gegen den gleichen Grenzwert $a \approx 92$ nm. Darüber hinaus gilt für alle Perioden b und Höhen h , sofern Kanteneffekte ausgeschlossen werden können, daß die optimale Flächenfüllung etwa $1/9$ beträgt ($b \approx 3 \cdot a$). (Abb. 3.17 (a)). Abweichungen von diesem Grenzwert finden sich nur, wenn bereits eine Kan-

tenüberhöhung der B_z -Komponente auftritt. So ist in Abb. 3.16 $a = 83$ nm, entsprechend dem Schnittpunkt der grünen und der blauen Kurve in Abb. 3.17 (a). Es ist deutlich, daß das zentrierte Quadratgitter, bei gleicher Periodizität in der B_z -Komponente, eine größere Feldmodulation aufweist. Im obigen Beispiel handelt es sich fast um einen Faktor zwei.

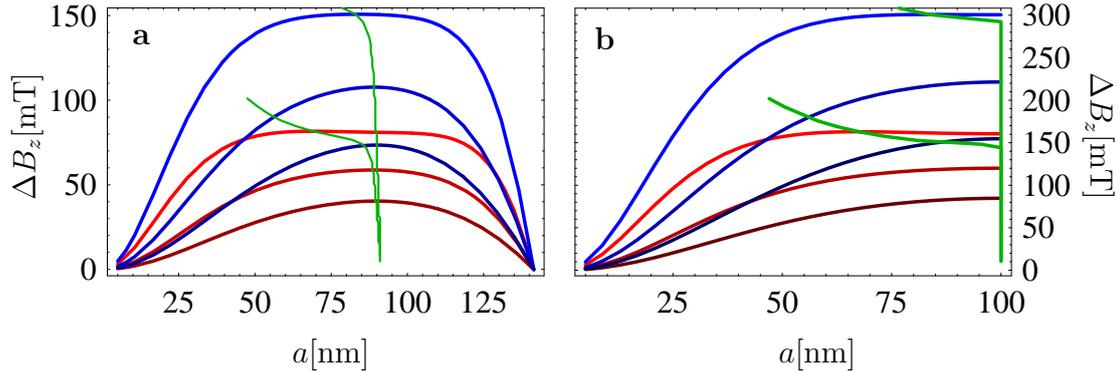


Abbildung 3.17: Maximale Modulation der B_z -Komponente senkrecht magnetisierter, quadratischer Kobaltteilchen im einfachen (a) und im zentrierten (b) Quadratgitter als Funktion der Kantenlänge a . Die roten Kurven beziehen sich auf Teilchen der Höhe $h = 5$ nm, die blauen auf $h = 10$ nm. Das Feld wurde für $z = 20$ nm, $z = 30$ nm, $z = 40$ nm ($z = 20$ nm, $z = 30$ nm, $z = 40$ nm) bestimmt. Die Perioden b sind analog zu Abb. 3.16. Die Lage der Extrema als Funktion der Höhe wird durch den Verlauf der grünen Graphen angezeigt.

3.3.4 Streufelder von Teilchenanordnungen mit dreizähliger Symmetrie

Gitter mit dreizähliger Symmetrie sind von besonderem Interesse, da in selbstorganisierten Strukturen von z. B. Diblock-Kopolymeren [15] oder porösem Aluminiumoxid [72] eine dichteste Flächenpackung realisiert wird. Die Methode der Herstellung bewirkt dabei, daß die Teilchen im Gitter kreisförmig sind⁷. Wieder gilt für senkrecht magnetisierte Teilchen, daß für kleine Höhen h eine Kantenüberhöhung auftritt, die aber für große h oder z verschwindet. In diesen Fällen kann die optimale Flächenfüllung einfach berechnet werden. Ist in einem dreizähligen Gitter der Abstand zum nächsten Nachbarn b , so ist der größtmögliche Radius $r_{\max} = b/2$. In diesem Grenzfall beträgt die Flächenfüllung $\pi/\sqrt{12} \approx 90\%$. Die Maxima der z -Komponente des Magnetfeldes liegen mittig über den magnetischen Scheiben. Wie in Abb. 3.18 befinden sich die

⁷Nutzt man die selbstorganisierten Strukturen als Maske zum Bedampfen, entsteht ein Lochmuster. Das Streufeld eines solchen Antigitters wird analog zum Gitter beschrieben.

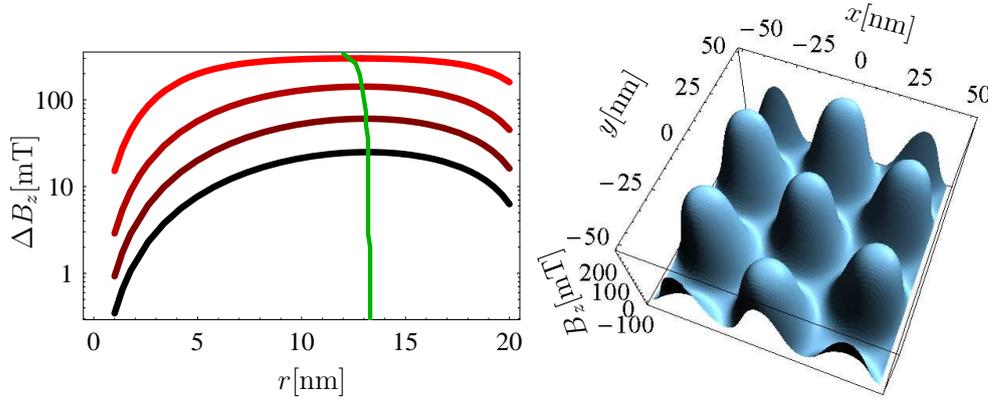


Abbildung 3.18: ΔB_z senkrecht magnetisierter, kreisförmiger Teilchen in einem dreizähligen Gitter als Funktion des Teilchenradius. Die Höhe ist $h = 10$ nm. Der Abstand zum nächsten Nachbarn beträgt $b = 40$ nm. Die Feldstärken wurden in den Abständen $z = 5$ nm, $z = 10$ nm, $z = 15$ nm und $z = 20$ nm berechnet. Zusätzlich ist die Lage der Maxima durch die grüne Kurve gekennzeichnet. Für $z = 5$ nm und $r = 12.4$ nm ist die B_z -Komponente als Funktion des Ortes dargestellt.

Minima mittig zwischen je drei Scheiben. Es ist zu erkennen, daß die optimale Strukturgröße in diesem Beispiel als Funktion des Abstandes schnell gegen 13.3 ± 0.05 nm konvergiert. Mit zunehmender Teilchenhöhe h ist die Konvergenz noch deutlicher. Der Grenzwert des optimalen Radius r_{opt} bleibt derselbe, und es gilt $r_{\text{opt}} \approx b/3$, so daß die Flächenfüllung im optimalen Fall $2\pi/\sqrt{3}^5 \approx 40\%$ ergibt.

Sind die Kreisscheiben in der Ebene magnetisiert, so kann als Folge der Streufeldwechselwirkung davon ausgegangen werden, daß die Magnetisierung parallele Ketten entlang der Gitterachsen ausbildet. Ansonsten verhält sich das System analog zum diagonal magnetisierten Schachbrettmuster. Für kleine Radien r liegen die Feldextrema auf der Kristallachse $y = x/\sqrt{3}$, wobei die genaue Lage der Extrema eine Funktion des Abstandes z ist. Im Bereich $r \lesssim b/2$ und für kleine Abstände z tritt eine Bifurkation auf und jede Kreisscheibe weist vier Extrema auf. Mit wachsendem Abstand z laufen diese Extrema aber schnell wieder zusammen. Die Bifurkation ist nur für kleine z zu beobachten. Analog zum diagonal magnetisierten Schachbrettmuster existiert auch für das Dreieckgitter zu jedem z ein optimales $r_{\text{opt}}(z)$, so daß der Abstand zwischen den Extrema gerade die Hälfte des Abstandes zum nächsten Nachbarn ist. Die Periodizität der Feldmodulation entlang dieser Achse ist dann gleich der Gitterperiodizität. Senkrecht dazu ergibt sich eine Modulation derselben Amplitude. Die Periode ist jedoch um den Faktor $\sqrt{3}$ größer. Damit sind die beiden Perioden inkommensurabel und die Struktur ist zur Erzeugung von Kommensurabilitätseffekten in Transportmessungen schlecht

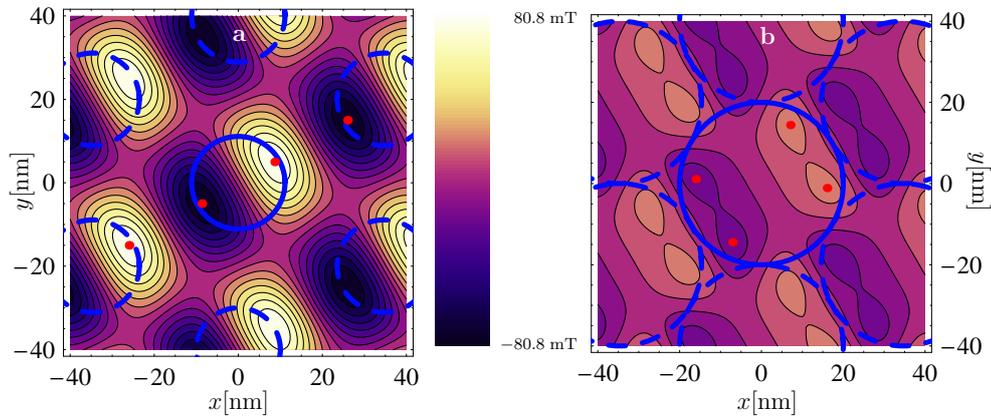


Abbildung 3.19: Kreisförmige Kobalteilchen der Höhe $h = 10$ nm in zentrierter Anordnung mit einem Nächsten-Nachbar-Abstand von $b = 40$ nm. Die Magnetisierung liegt parallel der Geraden $y = x/\sqrt{3}$. In (a) ist die optimale Strukturgröße $r = 11.1$ nm für den Abstand $z = 20$ nm. In (b) ist der Berührradius $r = 20$ nm gewählt. Die blauen Kreise zeigen die Lage der magnetischen Teilchen, die roten Punkte die Lage der Feldextrema.

geeignet.

Im Unterschied zum diagonal magnetisierten Quadrat ändert sich bei der Kreisscheibe die magnetische Oberflächenladungsdichte mit dem Azimutalwinkel. Der Fluß tritt überwiegend an einem Punkt aus. Dieses führt dazu, daß das Extremum für alle Radien r sehr dicht am Rand liegt. Folglich variiert der optimale Radius r_{opt} nur geringfügig mit der Dicke und dem Abstand und ist praktisch $r_{\text{opt}} \gtrsim b/2$ für alle z . Darüber hinaus tritt im Grenzfall sich berührender Scheiben fast kein Fluß aus, weil der austretende Fluß sehr konzentriert auf den Kontaktpunkt ist (vgl. Abb. 3.19 (b)). Auch bei quadratischen Teilchen kann es vorkommen, daß der Fluß konzentriert an einem Punkt austritt. Dies geschieht, wenn diagonal magnetisierte, quadratische Teilchen nicht vollständig homogen magnetisiert sind, sondern eine Bündelung der Magnetisierung zu den Ecken hin, einen sogenannten *flower state* [73], aufweisen.

Zusätzlich zu dem hexagonalen Gitter existieren noch zwei weitere bekannte Gitter mit dreizähliger Symmetrie; das sind das Honigwabengitter und das Kagome-Gitter. Experimentell läßt sich zumindest das Honigwabengitter realisieren. Hierzu wird eine Lage aus hexagonal angeordneten Kugeln auf der Oberfläche als Aufdampfmaske (*nanosphere lithography* [74]) benutzt. Dadurch entstehen zunächst dreieckige Strukturen mit konkaven Seiten. Je nach Material können sich diese Dreiecke bei hohen Temperaturen in energetisch günstigere Formen (Scheiben, Halbellipsoide) umwandeln [75]. Sowohl das Honigwabengitter als auch das Kagome-Gitter gehen aus dem einfach hexagonalen her-

vor. Das erste ist ein hexagonales Gitter mit zweiatomiger Basis. Sind die Basisvektoren $\vec{a}_1 = a_0(1, 0)$ und $\vec{a}_2 = a_0(1/2, \sqrt{3}/2)$, so ist in der Einheitszelle ein weiterer Punkt bei

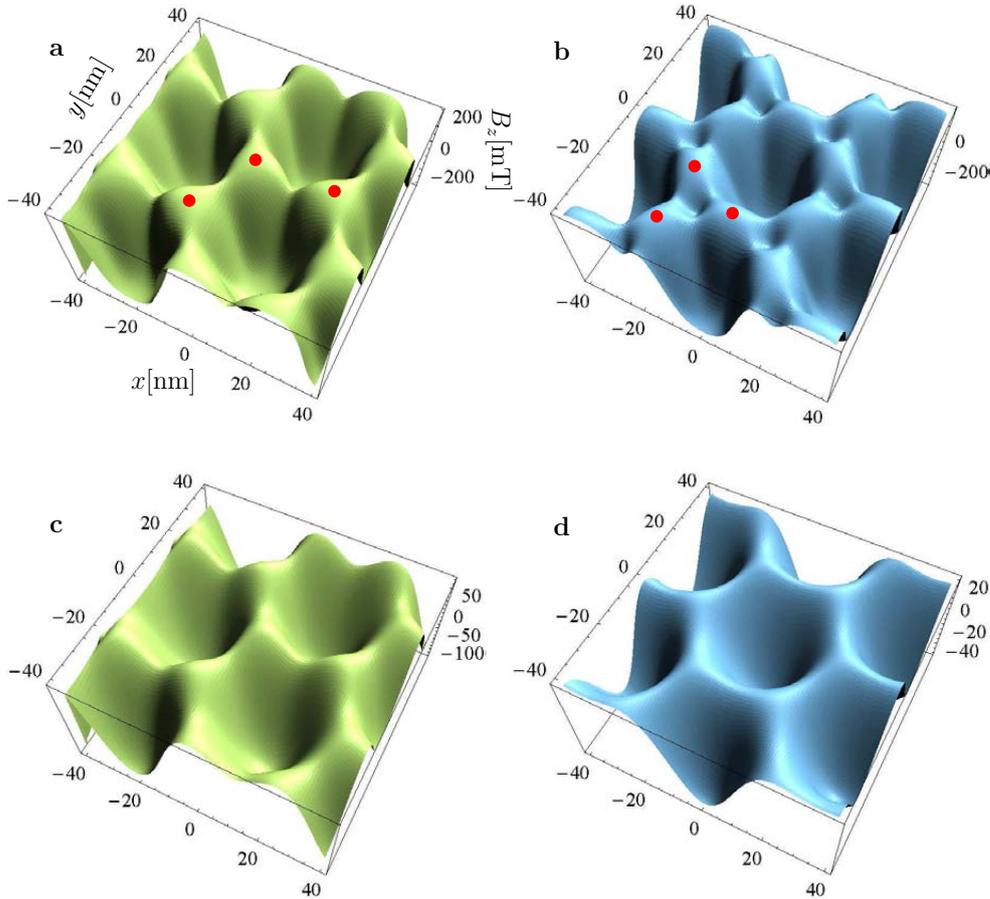


Abbildung 3.20: B_z -Komponente kreisförmiger Kobaltteilchen der Höhe $h = 10$ nm, angeordnet auf einem Honigwabengitter ((a) und (c)) sowie einem Kagome-Gitter ((b) und (d)). Der Abstand zwischen zwei globalen Minima beträgt 40 nm. Die Scheiben berühren einander. Die Lage einiger Scheiben ist exemplarisch durch einen roten Punkt gekennzeichnet. Das Feld wurde für $z = 4$ nm ((a) und (b)) sowie für $z = 15$ nm ((c) und (d)) berechnet.

$\vec{a}_b = a_0(1/2, -\sqrt{3}/6)$ zu setzen. Das Kagome-Gitter benötigt eine dreiatomige Basis $\vec{a}_{b1} = 1/2\vec{a}_1$ und $\vec{a}_{b2} = 1/2(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$. Beide Gitter können aber auch erzeugt werden, indem aus dem hexagonalen Gitter ein hexagonales Untergitter mit größerer Periode entfernt wird. Im Honigwabengitter hat dieses die Periode $a_H = \sqrt{3}a_0$, im Kagome-Gitter $a_K = 2a_0$. Das Kagome-Gitter ist dichter gepackt. Es füllt $3/4$ des hexagonalen Gitters; das Honigwabengitter füllt nur $2/3$. Die z -Komponente des Feldes über diesen beiden Gittern wurde in Abb. 3.20 für kleine und große Abstände z berechnet. Beide

Gitter zeigen eine Sechseckstruktur, die sich aber in Details voneinander unterscheidet. Für kleine Abstände z finden sich beim Kagome-Gitter lokale Minima zwischen drei aneinandergrenzenden Scheiben. Das Honigwabengitter zeigt zwischen aneinandergrenzenden Scheiben einen Sattelpunkt, der für alle Abstände z erhalten bleibt, jedoch mit wachsendem z ausflacht. Das globale Maximum ist stets über den Scheiben. Für das Kagome-Gitter findet man für große z das globale Maximum zwischen drei benachbarten Scheiben, dort wo für kleine Abstände ein lokales Minimum zu finden ist. Über den Scheiben ist für kleine z das globale Maximum, für große z eine Sattelfläche. Die Modulation beider Gitter ist maximal, wenn sich die magnetischen Kreisscheiben berühren.

Um alle Gitter mit dreizähliger Symmetrie miteinander vergleichen zu können, müssen die Gitterperioden derart gewählt werden, daß die magnetischen Perioden vergleichbar sind. Dieses ist der Fall, wenn die Abstände zwischen zwei globalen Minima im Honigwaben- und im Kagome-Gitter gleich dem Abstand zweier globaler Maxima im hexagonalen Gitter sind. Die maximale Feldmodulation dieser Gitter ist in Abb. 3.21 als Funktion des Abstandes z aufgetragen. Hierzu wurde nicht nur das hexagonale Gitter mit 90% Flächenfüllung berechnet sondern auch die optimale Füllung für jeden Abstand berücksichtigt. Das optimierte Gitter hat mit der geringsten Flächenfüllung von 40% die größte Feldmodulation, unterscheidet sich aber kaum vom Honigwabengitter mit einer Füllung von ca. 60%. Das Honigwabengitter ist fast das Antigitter des optimierten hexagonalen Gitters. Die Fläche ist zu 40% nicht gefüllt. Das Kagome-Gitter zeigt ebenfalls eine Ähnlichkeit zum hexagonalen Antigitter, weist aber mit einer Flächenfüllung von ca. 67.5% eine geringfügig (15%) schlechtere Feldmodulation auf. Eine Flächenfüllung von 50% ist wegen der Gittersymmetrie nicht die optimale Lösung. Für das zentrierte Quadratgitter ergibt eine halbe Füllung, das Schachbrettmuster, die maximale Feldmodulation. Je stärker die Flächenfüllung vom Verhältnis 60 zu 40 abweicht, desto geringer ist die Feldmodulation. Das vollständig gefüllte hexagonale Gitter mit einer Füllung von 90% ist um mehr als einen Faktor drei schlechter als das optimierte Gitter.

Entsteht das hexagonale Gitter durch Selbstorganisation von z. B. Mizellen, so kann der Füllgrad oder die Dicke des organischen Mantels beeinflußt werden. Auf diese Weise ließen sich durch Selbstorganisation hexagonale Gitter mit optimaler Flächenfüllung herstellen.

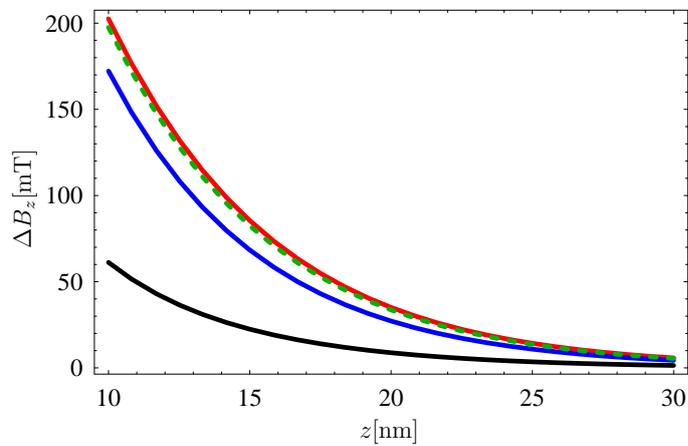


Abbildung 3.21: Maximale Modulation der B_z -Komponente kreisförmiger Kobaltteilchen der Höhe $h = 10$ nm, angeordnet auf einem Honigwabengitter (■ ■ ■), Kagome-Gitter (—), dem maximal gefüllten hexagonalen Gitter (—) sowie einem jeweils optimal gefüllten hexagonalen Gitter (—). Abgesehen vom optimierten hexagonalen Gitter berühren die Scheiben einander. Die Gitterperioden sind derart gewählt, daß für alle Gitter die magnetische Periode 40 nm ist (s. Text). Unterhalb von $z = 10$ nm ändert sich die Lage der globalen Extrema.

Kapitel 4

Fernfeldentwicklung der Streufeldwechselwirkung

Miniaturisierung spielt in Physik und Chemie eine wichtige Rolle, da auf diese Weise der Zugang zu neuen Phänomenen ermöglicht wird. Diese neuen Phänomene können wiederum Grundlage neuer technischer Anwendungen sein. Mit dem Ziel die Dichte von magnetischen Speichern oder Quantenpunkten zu erhöhen, z. B. durch Masken selbstorganisierter Mizellen, ist zwangsläufig eine Miniaturisierung verbunden. Im Falle von dicht angeordneten, polarisierten (magnetischen oder ferroelektrischen) Teilchen ist die Wechselwirkung der Teilchen untereinander für die Gesamtenergie und die Eigenschaften des Systems von großer Bedeutung und erfordert eine ausführliche Betrachtung.

Magnetische Festkörper endlicher Ausdehnung erzeugen bis auf wenige Ausnahmen, in denen $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ gilt, ein Streufeld im Außenraum¹. Die Felder haben eine unendliche Reichweite, d. h. sie fallen im Unendlichen nicht schneller als mit einer Potenz des Abstands. In einer Anordnung magnetischer Teilchen werden diese durch ihr Streufeld miteinander wechselwirken. Ist das Gesamtsystem der magnetischen Teilchen sehr groß, so ist der Beitrag zur Wechselwirkung einzelner, weit entfernter Teilchen zwar gering, kann in der Summe, als Folge des oben erwähnten Abstandverhaltens, jedoch wesentlich zur Gesamtenergie beitragen. Je geringer die Potenz mit der das Feld, bzw. das Potential mit der Entfernung fällt, desto größer ist der Beitrag zur Wechselwirkung. Dieser Tatsache wird bei der Entwicklung des Potentials nach Potenzen des reziproken Abstands, der Multipolwechselwirkung, Rechnung getragen. Die Stärke der Wechselwirkung zwischen den Teilchen nimmt mit kleiner werdendem Teilchenabstand zu. Ei-

¹Für Körper mit unendlicher Ausdehnung in mindestens eine Raumrichtung, wie zum Beispiel dem unendlich ausgedehnten dünnen Film, ist $\vec{\nabla} \cdot \vec{M} = 0$ nicht notwendig für das Verschwinden des Feldes im Außenraum.

ne Einführung in die Fernfeldentwicklung der Streufeldwechselwirkung findet man in Lehrbüchern [48].

Der Energiebeitrag durch die Wechselwirkung der Momente höherer Ordnung wird jedoch gegenwärtig nur in der physikalischen Chemie betrachtet. In der Festkörperphysik und der Wechselwirkung polarisierter Materie (magnetische und ferroelektrische Gitter, Kolloide usw.) ist es allgemein üblich, den Einfluß von Multipolmomenten, die in der Reihenentwicklung über das Dipolmoment hinausgehen, zu vernachlässigen oder für eine geringe Korrektur zu halten [30, 31]. Aus diesem Grund ist der Einfluß höherer Multipolmomente noch nicht systematisch untersucht worden.

Die allgemeine Formulierung der Multipolentwicklung ist in Kapitel 2.3.1 beschrieben. Für spezielle Teilchengemetrien lassen sich analytische Lösungen angeben. Eine Klasse dieser Geometrien sind prismenförmige axiale Teilchen mit n -facher Rotationssymmetrie, für $n \geq 2$. In diese Klasse fallen rechteckige und als Spezialfall auch quadratische Teilchen. Gleichseitige Dreiecke sind enthalten, ebenso wie alle anderen n -Ecke bis zum Grenzfall des Zylinders.

Die Theorie, welche es ermöglicht die Multipolmomente senkrecht magnetisierter, prismenförmiger Teilchen zu berechnen, kann darüber hinaus auf weitere Geometrien verallgemeinert werden.

4.1 Multipolmomente prismenförmiger Teilchen

Gegeben sei ein polarisiertes Teilchen mit n -facher Rotationssymmetrie in der x - y -Ebene und $n \geq 2$. Die Rotationsachse sei parallel zur Polarisation, welche in z -Richtung weist (Abb. 4.1). Als Folge der Polarisation ist die Oberfläche durch die unkompensierten Dipole positiv geladen. Die Ladungsverteilung an der Unterseite ist das negative Spiegelbild der Ladung an der Oberseite. Um die Gl. 2.33 zu integrieren, wird die Oberfläche in n identische Dreiecke zerlegt (Abb. 4.1). Dann berechnen sich die Q_{lm} als Summe über die Dreiecke ($0 \leq j \leq n-1$), jeweils auf der Ober- und Unterseite, zu

$$Q_{lm} = \sum_{j=0}^{n-1} \left(\int_{\substack{j\text{-tes Dreieck (oben)}}} dV \rho(\vec{r}) R_{lm}(\vec{r}) - \int_{\substack{j\text{-tes Dreieck (unten)}}} dV \rho(\vec{r}) R_{lm}(\vec{r}) \right) \quad (4.1)$$

Als Folge der Symmetrieeigenschaften der Kugelflächenfunktionen

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{l+m} Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi) \quad (4.2)$$

läßt sich die Summe über die unteren Dreiecke durch den Summanden $(-1)^{l+m+1}$ berücksichtigen. Die azimutale Symmetrie $Y_{lm}(\theta, \varphi) \propto e^{im\varphi}$ erlaubt es

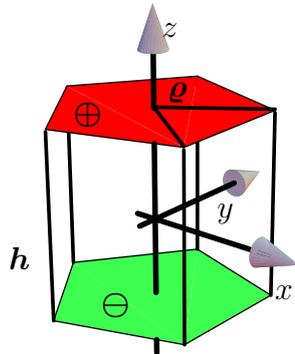


Abbildung 4.1: Skizze eines polarisierten Teilchens mit fünffacher Rotations-symmetrie. Die Ober- und Unterseite kann jeweils in fünf äquivalente, gleichseitige Dreiecke mit der Kantenlänge ρ zerlegt werden. Das Teilchen ist in z -Richtung polarisiert.

$$\begin{aligned}
 Q_{lm} &= \sum_{j=0}^{n-1} \int dV (1 + (-1)^{l+m+1}) |\rho(\vec{r})| R_{lm}(\vec{r}) \\
 &\quad \text{j-tes Dreieck (oben)} \\
 &= \int_{\text{ein Dreieck}} dV (1 + (-1)^{l+m+1}) |\rho(\vec{r})| \\
 &\quad \times R_{lm}(\vec{r}) \sum_{j=0}^{n-1} e^{im\frac{2\pi}{n}j} \\
 &= \int_{\text{ein Dreieck}} dV (1 + (-1)^{l+m+1}) |\rho(\vec{r})| \\
 &\quad \times R_{lm}(\vec{r}) \cdot n \cdot \delta_{0, \text{mod}(m,n)} \quad (4.3)
 \end{aligned}$$

zu schreiben, wobei das Kronecker- δ nur 1 ist, falls $n|m$ oder $m = 0$ gilt². Die Überführung der Summe in das Kronecker- δ läßt sich geometrisch begründen: Unter der Summe befindet sich eine Exponentialfunktion, die Werte sind somit Punkte auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene. Die Punkte sind äquidistant auf dem Einheitskreis mit dem Winkel $\alpha_j = im\frac{2\pi}{n}j$ für den j -ten Punkt. In Abb. 4.2 ist zu erkennen, daß die Summe über alle Punkte einen geschlossenen Kettenzug ergibt und somit Null ist. Bis auf zwei Ausnahmen ändert sich hieran nichts, wenn m wächst. Alle Winkel vervielfachen sich um m , wobei die Reihenfolge der Punkte permutiert und der äquidistante Abstand erhalten bleibt. Die einzigen Ausnahmen sind $m = 0$ oder m ist Vielfaches von n . In diesen Fällen ist das Argument der Exponentialfunktion Null oder ein Vielfaches von 2π , und die Exponentialfunktion ergibt eins. Aus einer anderen Sicht hat man in diesen Fällen, bis auf Vielfache von 2π ein gemeinsames Vielfaches aller Winkel. Es wird also n mal über eins summiert. Für $n|m$ oder $m = 0$ ergibt die Summe folglich n . In allen anderen Fällen ergibt sie Null.

Die Symmetrie der Gl. 4.3 erlaubt mehrere Schlußfolgerungen. Multipolmomente mit geradzahligem l existieren nur für $n \geq 3$. Innerhalb der untersuchten Symmetrieklasse sind keine Quadrupolmomente ($l = 2$) erlaubt. Ist nämlich l geradzahlig, so muß m ungeradzahlig sein. Ist dieses nicht der Fall, ist der Term $1 + (-1)^{l+m+1}$ Null. Das vom Betrag kleinstmögliche m ist $m = 0$. Null zählt hier als gerade Zahl. Das Kronecker- δ

² Dabei bedeutet $n|m$, daß n Teiler von m ist.

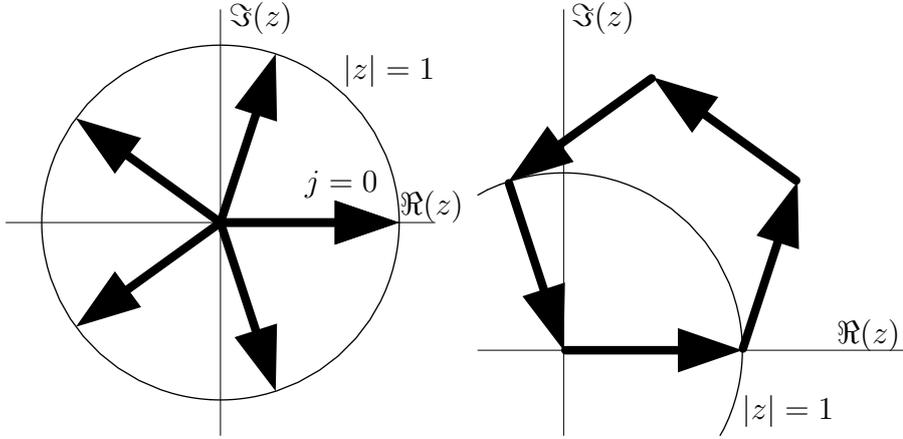


Abbildung 4.2: Werte der Exponentialfunktion aus Gl. 4.3 für den Fall $n = 5$ auf dem Einheitskreis ($|z| = 1$) angeordnet (links). Der Punkt für $j = 0$ liegt immer auf der reellen Achse. Die Benennung der anderen Punkte variiert mit m . Die Punkte liegen äquidistant, falls $m \neq 0$ und m nicht Vielfaches von n ist. Die Summe aller Punkte ergibt dann in der komplexen Ebene einen geschlossenen Kettenzug (rechts), ein regelmäßiges n -Eck. Die Summe ist Null.

erzwingt, daß das nächstgrößere m gerade ein Vielfaches von n ist. Im einfachsten Fall ist also $n = m$. Das kleinstmögliche Multipolmoment mit geradzahligem l bei einem dreieckigen Prisma ist somit $(l, m) = (4, 3)$. Es ist $n = m$ und l ist geradzahlig. Für ein Prisma mit fünfzähliger Rotationssymmetrie ist das kleinstmögliche Multipolmoment mit geradzahligem l aus den eben genannten Gründen $(l, m) = (6, 5)$. Darüber hinaus läßt sich sagen, daß Prismen mit geradzahliger Symmetrie nur geradzahlige m zulassen und damit niemals ungeradzahlige Multipolmomente aufweisen. In diesem speziellen Fall kann noch die Paritätseigenschaft der Kugelflächenfunktionen ausgenutzt werden.

$$\hat{P}Y_{lm}(\theta, \varphi) := Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^m Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (4.4)$$

Da die Oberflächenladungsverteilung eine negative Parität ($\rho(-\vec{r}) = -\rho(\vec{r})$) aufweist, vereinfacht sich die Berechnung der Multipolmomente von Prismen mit geradzahligem n zu

$$Q_{lm} = \int_{\text{ein Dreieck}} dV |\rho(\vec{r})| R_{lm}(1 + (-1)^{l+1}) \cdot n \cdot \delta_{0, \text{mod}(m, n)}, \quad (4.5)$$

und l muß, wie am Term $1 + (-1)^{l+1}$ zu sehen ist, ungeradzahlig sein. Für ein Teilchen mit quadratischer Grundfläche der Kantenlänge a (bei einem Quadrat somit $\varrho = a/\sqrt{2}$)

und der Höhe h mit homogener Polarisierung entlang der z -Richtung lautet das Integral

$$Q_{lm} = \int_0^{\frac{a}{2}} dx \int_{-x}^x dy \cdot \rho_0 \cdot (1 - (-1)^l) \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} (1^m + (i)^m + (-1)^m + (-i)^m) \\ \times \sqrt{x^2 + y^2 + \frac{h^2}{4}} Y_{lm}(\arccos \frac{\frac{h}{2}}{\sqrt{x^2 + y^2 + \frac{h^2}{4}}}, \arctan \frac{y}{x}). \quad (4.6)$$

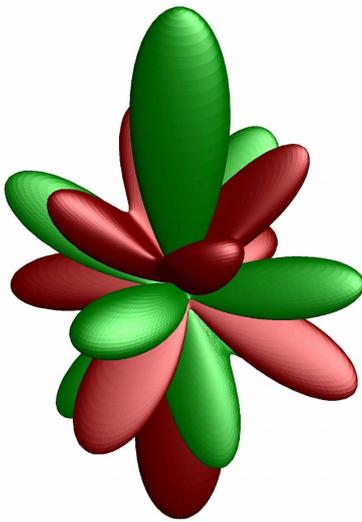


Abbildung 4.3: Äquipotentialfläche zum Dotriakontapolmoment eines in z -Richtung polarisierten Würfels. Die roten und grünen Flächen repräsentieren vom Betrage her gleiche Flächen von entgegengesetztem Vorzeichen (*rot* positiv, *grün* negativ).

Die nächsthöhere Korrektur zum Dipolmoment ist für den Würfel somit das Dotriakontapolmoment ($2^5 = 32$). Der Dotriakontapol ist in Abb. 4.3 dargestellt. Die Oberfläche kann als Äquipotentialfläche interpretiert werden. Hierbei ist *rot* als positive, der magnetische Nordpol, *grün* vom Betrage her gleich aber negativ, der magnetische Südpol, zu betrachten. In positiver z -Richtung schwächt der Dotriakontapol den Dipol während er in Richtung der Ecken verstärkend wirkt. Sollte die Ausrichtung der Polarisierung im Prisma zwar homogen, nicht aber parallel zur z -Achse sein, so sind auch Multipolmomente durch die geladenen Seitenflächen zu berücksichtigen. Dieser Fall erfordert aber keine neue Rechnung, da er bereits vollständig durch die obige Methode erfaßt wird.

Dieses Integral kann direkt ausgewertet werden und ist bis zu sehr hohen Ordnungen analytisch lösbar. Da Drehsymmetrien mit $n > 1$ betrachtet werden, ist das Auftreten einer Unstetigkeit der Arkustangensfunktion innerhalb der Integrationsgrenzen ausgeschlossen. Die Lösungen für die ersten Ordnungen $1 \leq l \leq 7$ sind in Tabelle 4.1 zusammengefaßt. In der ersten Zeile der Tabelle ist abzulesen, daß der erste Term, das Dipolmoment, proportional zur Oberfläche ($a^2 = 2Q^2$) und somit zur Oberflächenladung sowie der Höhe h des Teilchens ist. Dieses entspricht der Definition eines Dipolmomentes $\vec{p} = q\vec{r}$, wenn \vec{r} der Vektor von einer negativen zu einer positiven Punktladung mit den Ladungen $-q$ und q ist.

Da die Drehsymmetrie vierzählig ist, treten keine geradzahigen l auf. Darüber hinaus verschwindet das Oktopolmoment ($l = 3$) im Falle von $h^2 = 2Q^2 = a^2$. Der Würfel hat somit kein Oktopolmoment [76]. Die

Tabelle 4.1: Die Multipolmomente Q_{lm} (in Einheiten der Oberflächenladungsdichte) bis zur Ordnung $l = 7$ eines Teilchens mit vierzähliger Symmetrie, m ist also Null oder ein Vielfaches von vier. Alle Q_{lm} mit geradzahligem l verschwinden. Aus der Symmetrie der Kugelflächenfunktionen ergeben sich die Momente mit negativem m aus $Q_{l-m} = (-1)^m Q_{lm}^*$. Im Falle des Würfels $h = \sqrt{2}a$ gilt $Q_{30} = 0$.

| | $m = 0$ | $m = 4$ |
|---------|--|---|
| $l = 1$ | $2h\varrho^2$ | |
| $l = 3$ | $h\varrho^2(\frac{h^2}{2} - \varrho^2)$ | |
| $l = 5$ | $\frac{h^5\varrho^2}{8} - \frac{5h^3\varrho^4}{6} + \frac{7h\varrho^6}{12}$ | $-\sqrt{\frac{7}{10}} \frac{h\varrho^6}{4}$ |
| $l = 7$ | $\frac{h^7\varrho^2}{32} - \frac{7h^5\varrho^4}{16} + \frac{49h^3\varrho^6}{48} - \frac{3h\varrho^8}{8}$ | $\sqrt{\frac{33}{14}} \frac{h\varrho^8}{8} - \sqrt{\frac{77}{6}} \frac{h^3\varrho^6}{16}$ |

Jede Prismenseite ist ein Rechteck und die Berechnung des Multipolmoments kann auf die eines Rechtecks zurückgeführt werden, wobei die z -Achse als Oberflächennormale der Seitenfläche angenommen wird. Ist die Anzahl der Ecken n gerade, so sind nur die Momente eines Quaders mit zweizähliger Symmetrie zu berechnen. Die Momente müssen dann mittels der *Wigner-D-Funktion* (Kap. 2.3.3) in das ursprüngliche Koordinatensystem überführt werden. Diese Vorgehensweise ist für alle Paare von Seitenflächen, für die eine Projektion der Polarisation auf die Oberflächennormale existiert, zu wiederholen. Ist die Anzahl der Ecken ungerade, fehlen einige Symmetrieargumente, welche zur Herleitung verwendet wurden. In diesem Fall sind kompliziertere Formeln mit weniger Symmetrieeigenschaften zu verwenden. Der Lösungsweg ändert sich prinzipiell jedoch nicht. Die Multipolmomente des Prismas ergeben sich dann als Superposition.

Die bisherigen Rechnungen erfassen noch nicht den Grenzfall eines Zylinders als Prisma mit unendlich vielen Ecken. Um diesen zu berechnen wird in Gl. 4.3 nicht über Dreiecke summiert. Stattdessen wird das Integral in Zylinderkoordinaten ausgewertet.

$$\begin{aligned}
 Q_{lm} = & \int_0^{\varrho} \kappa d\kappa \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot (1 - (-1)^l) \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \\
 & \times \rho_0 \sqrt{\kappa^2 + \frac{h^2}{4}}^l Y_{lm}(\arctan \frac{2\kappa}{h}, \varphi)
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Dieses Integral ist analytisch lösbar. Es treten nur ungerade l auf und nur $m = 0$ ist erlaubt. Die Symmetrie des Problems legt eine so geartete Lösung nahe, mathematisch

begründet es sich in der φ -Abhängigkeit der Kugelflächenfunktion,

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \propto e^{-im\varphi} = \cos(m\varphi) - i \sin(m\varphi). \quad (4.8)$$

Da m ganzzahlig ist, ergibt das Integral über φ auf dem Intervall $[0, 2\pi]$ Null. Die Multipolmomente für den axial polarisierten Zylinder sind in Tabelle 4.2 bis zur Ordnung $l = 7$ aufgeführt.

Tabelle 4.2: Die Multipolmomente Q_{lm} (in Einheiten der Oberflächenladungsdichte) eines Teilchens mit zylindrischer Symmetrie und senkrechter Magnetisierung bis zur Ordnung $l = 7$. Alle Q_{lm} mit geradzahligem l verschwinden. Aus Symmetriegründen muß $m = 0$ gelten.

| | $m = 0$ |
|---------|--|
| $l = 1$ | $\pi h \varrho^2$ |
| $l = 3$ | $\frac{\pi}{4} h \varrho^2 (h^2 - 3\varrho^2)$ |
| $l = 5$ | $\frac{\pi}{16} h \varrho^2 (h^4 - 10h^2\varrho^2 + 10\varrho^4)$ |
| $l = 7$ | $\frac{\pi}{64} h \varrho^2 (h^6 - 21h^4\varrho^2 + 70h^2\varrho^4 - 35\varrho^6)$ |

Zusätzlich zu den Multipolmomenten für eine axiale Magnetisierung lassen sich, wie auch bei den Prismen, die Multipolmomente für eine Magnetisierung in der Ebene berechnen. Der allgemeine Fall ist wieder als Superposition der Spezialfälle zu berechnen. Die Ladungsdichte auf der Zylinderwand genügt für eine homogene Magnetisierung einer Kosinusverteilung in Abhängigkeit vom Azimutalwinkel φ . Das Integral zur Berechnung der Momente hat dann die Form

$$Q_{lm}^p = \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} dz \int_{-\pi}^{\pi} \varrho d\varphi \cdot \rho_0 \cdot \cos^p \varphi \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \\ \times \sqrt{z^2 + \varrho^2}^l \cdot Y_{lm}\left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{z}{\varrho}, \varphi\right). \quad (4.9)$$

Da das Integral mit $\cos^p \varphi$ gewichtet ist, erlaubt die φ -Abhängigkeit der Kugelflächenfunktion im Falle homogener Magnetisierung ($p = 1$) gemäß Gl. 4.8 nur

$m \in \{-1, 1\}$, da die trigonometrischen Funktionen der Orthonormalitätsbeziehung

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \sin n\varphi \sin m\varphi &= \delta_{n,m} \\ \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \cos n\varphi \cos m\varphi &= \delta_{n,m} \\ \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \cos n\varphi \sin m\varphi &= 0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

genügen, mit $n, m \in \mathbb{Z}$.

Die Funktionen aus Tabelle 4.2 sind in Abb. 4.4 dargestellt. Die Multipolmomente sind auf das Dipolmoment normiert und als Funktion der Zylinderhöhe aufgetragen. Die Auftragung gegen h/ϱ läßt vermuten, daß die Multipolmomente einfach skalieren und die Wahl von ϱ beliebig ist. Dieses ist jedoch nicht der Fall. Die Skaleninvarianz trifft für das Potential zu, welches mittels der Multipolmomente entwickelt wird. Die Berechnung des Potentials im Abstand r ist also skaleninvariant bei Verwendung der obigen Multipole, wenn r in Einheiten von ϱ gemessen wird. Da das Potential zum l -ten Multipolmoment aber mit $r^{-(l+1)}$ mit dem Abstand fällt, skalieren die Momente mit ϱ^{l+1} . Um eine skaleninvariante Darstellung der Multipolmomente in Abb. 4.4 zu erhalten, wären die Multipolmomente mit ϱ^{-l-1} zu multiplizieren.

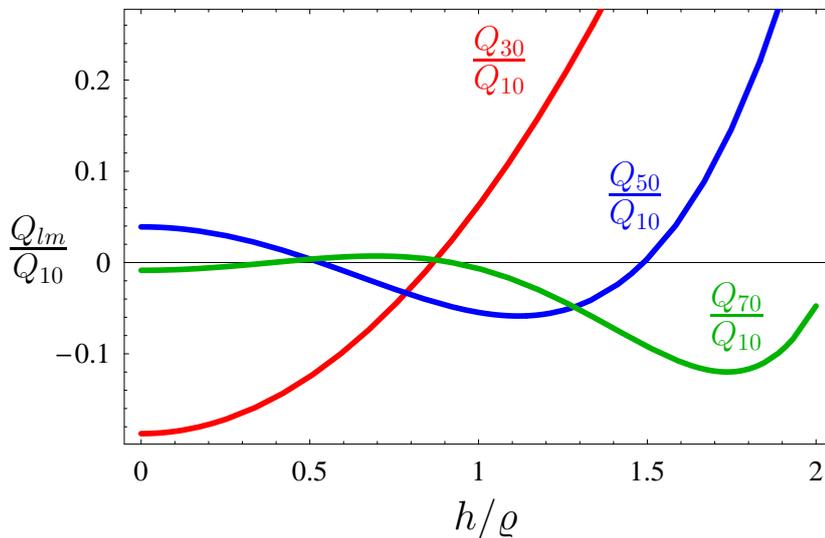


Abbildung 4.4: Die Multipolmomente einer senkrecht magnetisierten Kreisscheibe in Einheiten des Dipolmomentes als Funktion der Höhe h in Einheiten des Radius $\varrho = 1$.

Tabelle 4.3: Die Multipolmomente Q_{lm} (in Einheiten der Oberflächenladungsdichte) eines Teilchens mit zylindrischer Symmetrie und Magnetisierung in der Ebene bis zur Ordnung $l = 7$. Angegeben sind die Momente $Q_{l-1} = (-1)^m Q_{l1}^*$. Die geradzahigen Momente verschwinden.

| | $m = -1$ |
|---------|--|
| $l = 1$ | $\frac{\pi h \varrho^2}{\sqrt{2}}$ |
| $l = 3$ | $\frac{\pi h \varrho^2}{4\sqrt{3}}(h^2 - 3\varrho^2)$ |
| $l = 5$ | $\frac{\sqrt{3}\pi h \varrho^2}{16\sqrt{10}}(h^4 - 10h^2\varrho^2 + 10\varrho^4)$ |
| $l = 7$ | $\frac{\pi h \varrho^2}{32\sqrt{14}}(h^6 - 21h^4\varrho^2 + 70h^2\varrho^4 - 35\varrho^6)$ |

Des weiteren läßt sich die bisher entwickelte Mathematik auch benutzen, um die Multipolmomente einer Kreisscheibe mit einer beliebigen Oberflächenladungsdichte auf dem Rand zu berechnen. Da sich eine beliebige Oberflächenladungsdichte nach Sinus- und Kosinusfunktionen entwickeln läßt, benötigt man zusätzlich zu Gl. 4.9 ein zweites Integral, in dem $\cos^p \varphi$ durch $\sin^p \varphi$ ersetzt ist. Dieses Integral ist aber ebenfalls analytisch lösbar. Die Gl. 4.9 kann für ungerade Parität noch vereinfacht werden zu

$$Q_{lm}^p = \int_0^{h/2} dz \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \varrho d\varphi \cdot (1 - (-1)^l)(1 - (-1)^m) \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \times \rho_0 \cos^p \varphi \sqrt{z^2 + \varrho^2} Y_{lm}\left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{z}{\varrho}, \varphi\right). \quad (4.11)$$

Dieses Integral ist für alle ungeradzahigen $p \in \mathbb{N}$ lösbar. Eine Verteilung, welche diese Paritätseigenschaften besitzt, ist z. B. der *onion-state* [77]. Als Folge der Orthogonalität der trigonometrischen Funktionen (Gl. 4.10), können nur Momente mit $|m| \leq p$ auftreten, für $p = 1$ somit nur $m = \pm 1$. Die Multipolmomente mit $m = 1$ für verschiedene Ordnungen l ($p = 1$) sind in Tabelle 4.3 angegeben. Für die Momente Q_{lm}^p mit unterschiedlichem p gilt $Q_{l1}^3/Q_{l1}^1 = 3/4$ und $Q_{l1}^5/Q_{l1}^1 = 5/8$. Teilt man die Integration aus Gl. 4.9 in zwei Integrale auf, eines für $0 < \varphi < \pi$ und eines für $0 > \varphi > -\pi$, und versieht diese mit unterschiedlichem Vorzeichen, ergeben sich sofort die leicht zu berechnenden Multipolmomente einer zweidomänigen Kreisscheibe, die in Tabelle 4.4 angegeben sind.

Tabelle 4.4: Die Multipolmomente Q_{lm} (in Einheiten der Oberflächenladungsdichte) eines zweidomänen Teilchens mit zylindrischer Symmetrie und Magnetisierung in der Ebene bis zur Ordnung $l = 6$. Angegeben sind die Momente $Q_{lm} = (-1)^m Q_{l-m}^*$ mit $|m| > 0$. Die ungeradzahligen Momente verschwinden.

| | $m = 2$ | $m = 4$ | $m = 6$ |
|---------|---|---|---|
| $l = 2$ | $i \sqrt{\frac{8}{3}} h \varrho^3$ | | |
| $l = 4$ | $i \sqrt{\frac{5}{18}} h \varrho^3 (h^2 - 2\varrho^2)$ | $i \sqrt{\frac{15}{45}} h \varrho^5$ | |
| $l = 6$ | $i \sqrt{\frac{7}{15}} \frac{h \varrho^3 (h^2 - 2\varrho^2)}{12}$ | $i \sqrt{\frac{7}{2}} \frac{h \varrho^5 (5h^2 - 6\varrho^2)}{30}$ | $i \sqrt{\frac{33}{7}} \frac{3h \varrho^7}{20}$ |

4.2 Wechselwirkungsenergie zwischen beliebigen Multipolmomenten

Die Entwicklung zur Wechselwirkung zweier Ladungsverteilungen ist in Kap. 2.3.2 eingeführt worden. Im vorherigen Abschnitt 4.1 wurde gezeigt, daß sich die Multipolmomente aller rotationssymmetrischen Prismen sowie die der Zylinder analytisch berechnen lassen. In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß Multipolmomente höherer Ordnung eine wichtige Rolle spielen können. Im Falle strukturierter Dünnschichtsysteme können höhere Korrekturen von gleicher Größenordnung wie das Dipolmoment sein. Darüber hinaus übersteigen Momente höherer Ordnung die Stärke des Dipolmoments für gestreckte Körper, wie zum Beispiel mit magnetischem Material gefüllte Kohlenstoff-Nano-Röhrchen [78]. Im Folgenden soll am Beispiel eines homogen magnetisierten Quaders untersucht werden, ob die Multipolmomente mit $l > 1$ merkliche Korrekturen zur Dipol-Dipol-Wechselwirkung liefern.

Gegeben seien zwei Quader A und B mit quadratischer Grundfläche der Kantenlänge $a = \sqrt{2}\varrho$ und der Höhe h . Die Kanten der Quader seien parallel zu den Koordinatenachsen ausgerichtet und der Verbindungsvektor \vec{R} zwischen den Ladungsschwerpunkten sei parallel zur x -Achse. Beide Quader sind parallel zur z -Achse, also entlang h homogen magnetisiert. Die Multipolmomente für diesen Fall sind Tab. 4.1 zu entnehmen. Die Wechselwirkungsenergie kann gemäß Gl. 2.38 leicht berechnet werden. Die Beiträge der verschiedenen Ordnungen sind in Tab.4.5 zusammengefaßt.

Die Wechselwirkungsenergie als Funktion des Achsenverhältnisses $h/a = h/(\sqrt{2}\varrho)$ im Fall $R = 1.2a$ findet sich Abb. 4.5. Im Grenzfall dünner Schichten $h \ll a$ trägt die Oktopol-Dipol-Energie zusätzlich zur Dipol-Dipol-Energie weitere 26% bei. Die Oktopol-Oktopol-Energie ergibt weitere 19% und auch alle höheren Beiträge liefern

Tabelle 4.5: Wechselwirkungsenergie der Multipolmomente (in Einheiten der quadratischen Oberflächenladungsdichte, $\rho^2/(4\pi\mu_0)$) zweier Teilchen mit vierzähliger Rotationssymmetrie. Die Ausrichtung der Teilchen sowie ihre Lage zueinander ist im Text beschrieben. Jeder Eintrag der Tabelle repräsentiert die Wechselwirkung des Momentes $Q_{l_A}^A$ mit $Q_{l_B}^B$. Der Index m ist ausgelassen, da die Summation über m ausgeführt wurde. Da die Tabelle symmetrisch ist, sind doppelte Einträge zur Klarheit freigelassen.

| | Q_1^A | Q_3^A | Q_5^A |
|---------|-----------------------------|--|---|
| Q_1^B | $\frac{4h^2\varrho^4}{R^3}$ | $-\frac{3h^2\varrho^4(h^2-2\varrho^2)}{2R^5}$ | $\frac{h^2\varrho^4(15h^4-100h^2\varrho^2+28\varrho^4)}{32R^7}$ |
| Q_3^B | | $\frac{25\varrho^4(h^3-2h\varrho^2)^2}{16R^7}$ | $-\frac{7h^2\varrho^4(105h^6-910h^4\varrho^2+1692h^2\varrho^4-584\varrho^6)}{768R^9}$ |
| Q_5^B | | | $\frac{7h^2\varrho^4(567h^8-7560h^6\varrho^2+28776h^4\varrho^4-23840h^2\varrho^6+9328\varrho^8)}{4096R^{11}}$ |

noch merkbare Korrekturen. Wie bereits bei den Multipolmomenten, so sind auch die Wechselwirkungsenergien nicht skaleninvariant. Da aber die Multipolmomente Q_A und Q_B mit ϱ^{l_A+1} bzw. ϱ^{l_B+1} skalieren und der geometrische Wechselwirkungstensor aus Gl. 2.38 mit $\varrho^{-(l_A+l_B+1)}$ skaliert, variieren alle Energien gleich. Der Quotient zweier Energien ist somit skaleninvariant.

Die Gesamtenergie der Multipol-Multipol-Wechselwirkung zweier Teilchen mit der Geometrie aus Abb. 4.5 ist in Abb. 4.6 berechnet; die Teilchen haben dabei eine feste Höhe von $h = 0.4a$. Variiert wird der Abstand R zwischen den Teilchen. Es zeigt sich, daß die Dipol-Dipol-Wechselwirkung für den Teilchenabstand $R = 2a$ nur 80% der gesamten Wechselwirkungsenergie ausmacht; bei $R \leq 2a$ sollte mindestens das Oktupolmoment in der Wechselwirkung berücksichtigt werden. Für $R \leq 1.2a$ kommen

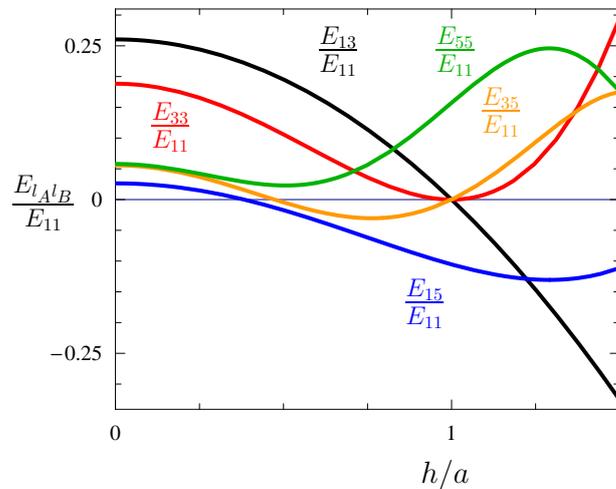


Abbildung 4.5: Die Wechselwirkungsenergie der Multipolmomente zweier Teilchen mit quadratischer Grundfläche der Kantenlänge a im Abstand $R = 1.2a$ als Funktion der Höhe h . Die Kanten der Teilchen sind parallel zu den Koordinatenachsen. Die Magnetisierung ist parallel z , der Verbindungsvektor zwischen den Quadern parallel x . Die Energien sind auf die Dipol-Dipol-Wechselwirkung normiert.

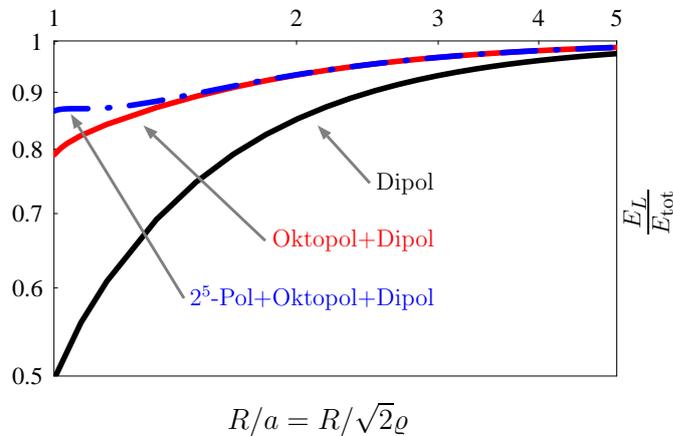


Abbildung 4.6: Die Summe der Wechselwirkungsenergien bis zu den Ordnungen $l = 1, 3, 5$ normiert auf die totale Energie E_{tot} , die mittels der exakten Lösungen für das Potential berechnet ist, als Funktion des Teilchenabstandes R . Das Achsenverhältnis beträgt $h/a = 0.4$.

wichtige Korrekturen durch das Dotriakontapolmoment hinzu.

Der Einfluß höherer Multipolkomponenten auf die Gesamtenergie ist zu berücksichtigen, wenn der Abstand zwischen zwei wechselwirkenden Teilchen von der gleichen Größenordnung wie ihr Durchmesser ist. Es ist aber darauf zu achten, daß die Winkelabhängigkeit mit zunehmender Multipolordnung immer komplexer wird. So könnte der Betrag eines Multipolmoments zur Gesamtenergie in einer bestimmten Geometrie verschwinden, selbst wenn dieses Moment die Wechselwirkung dominiert. Bei einem Vergleich der Wechselwirkungsenergien unterschiedlicher Multipolmomente ist folglich die Wahl der Wechselwirkungsgeometrie zu berücksichtigen, bzw. eine den Momenten angemessene Geometrie zu wählen. Ist andererseits die Wechselwirkung isotrop bezüglich der relativen Lage der Momente, so wird die Ordnung nicht beeinflußt, selbst wenn die Wechselwirkung den größten Beitrag zur Gesamtenergie liefert. In diesem Fall werden Momente wichtig, die eine Winkelabhängigkeit und eine damit verbundene Anisotropie aufweisen.

Kapitel 5

Multipolinduzierte Ordnung in zweidimensionalen Gittern

In den vorherigen Kapiteln ist bereits gezeigt, daß sich die Multipolmomente homogen magnetisierter Teilchen axialer Symmetrie sowie spezieller anderer Geometrien einfach berechnen lassen. In einem System wechselwirkender Teilchen ist die einfachste Ordnung, eine homogene Ausrichtung der Momente, im Allgemeinen nicht der energetische Grundzustand. Dieses wird bereits aus der Zweiteilchen-Wechselwirkung klar. Für zwei Dipole ist die axiale und damit parallele Ausrichtung mit der niedrigsten Energie verbunden. Quadrupole haben dagegen die geringste Paarwechselwirkungsenergie bei rechtwinkliger Ausrichtung. Betrachtet man darüber hinaus vier Teilchen auf den Ecken eines Quadrates, so ist offensichtlich für Dipole zwar eine parallele, nicht jedoch eine axiale Ausrichtung möglich. Abhängig von den Multipolmomenten und der Symmetrie des Gitters auf dem diese angeordnet sind, weist der energetische Grundzustand eine andere Ordnung auf. Diese multipolinduzierten Ordnungsphänomene könnten gezielt genutzt werden, um Prozesse der Selbstorganisation und somit die finale Ordnung zu beeinflussen.

Gegenstand dieses Kapitels ist die Vorhersage von Ordnung, die sich in einem System multipolar wechselwirkender Teilchen einstellt. Um den Einfluß höherer Multipolmomente auf die Ordnung in Systemen aus wechselwirkenden Teilchen systematisch zu untersuchen ist es sinnvoll, zunächst nur Teilchen zu betrachten, welche nur ein einziges Multipolmoment (Dipol, Quadrupol bis hin zum Dotriakontapol) aufweisen. Derartig idealisierte Teilchen werden im Folgenden als Multipole bezeichnet.

5.1 Monte Carlo-Simulation

Um den Grundzustand eines Systems wechselwirkender Multipole zu bestimmen sind ausführliche Monte Carlo-Rechnungen durchgeführt worden. Zu diesem Zweck wurde ein Programm-Code entwickelt, der die Berechnung beliebiger Multipole auf beliebigen Gittern ermöglicht. Wichtige Aspekte des entwickelten Programms sind im Anhang G angegeben.

5.1.1 Die Funktionsweise des Simulationsprogramms

Das entwickelte Programm ist von der Struktur (s. Anhang G) ein klassisches Monte Carlo-Programm. Zunächst werden aus externen Dateien alle Basisdaten gelesen; dazu gehört ein Satz von Gitterpunkten in drei Dimensionen, die Anzahl der auszuführenden Iterationen sowie die virtuelle Temperatur des Systems (siehe unten) und ein mögliches Abkühlen oder aufwärmen. Ebenso müssen die Multipolmomente, die später miteinander wechselwirken sollen, eingelesen werden. Die Datenstruktur erlaubt es dabei gleichzeitig eine beliebige Anzahl von Multipolmomenten unterschiedlicher Ordnung zu berücksichtigen. Nachdem alle Daten geladen und das Programm initialisiert wurde, führt das Programm eine Monte Carlo-Simulation aus. Für einen Zustand A wählt das Programm einen neuen Zustand B aus und muß dann entscheiden, ob dieser Zustand tatsächlich angenommen wird. Ein Algorithmus, der physikalisch sinnvolle Ergebnisse liefern soll, muß dabei die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts erfüllen [79]. Für die zwei Zustände A und B gilt dann

$$P(A)P(A \rightarrow B) = P(B)P(B \rightarrow A). \quad (5.1)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeit des Zustandes A ist $P(A)$, die von B ist $P(B)$. Die Übergangswahrscheinlichkeit von Zustand A zu B ist $P(A \rightarrow B)$, und analog ist $P(B \rightarrow A)$ die Übergangswahrscheinlichkeit von B zu A . Die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts wird z. B. vom Metropolis-Algorithmus [80] erfüllt, der in dem verwendeten Monte Carlo-Programm realisiert ist. In einem Monte Carlo-Schritt wird nacheinander für jedes Multipolmoment des Gitters eine neue Orientierung gewählt. Für die neue Orientierung wird die neue Gesamtenergie des Systems berechnet. Ist die neu berechnete Energie E_{neu} kleiner als die bisherige Energie E_{alt} , so wird der neue Zustand akzeptiert. Ist die Energie des neuen Zustands höher, wird dieser nicht sofort verworfen und der alte Zustand nicht sofort wieder hergestellt. Es wird zunächst eine weitere Zufallszahl $0 \leq a \leq 1$ erzeugt. Gilt

$$a < e^{-\frac{E_{\text{alt}} - E_{\text{neu}}}{k_B T}}, \quad (5.2)$$

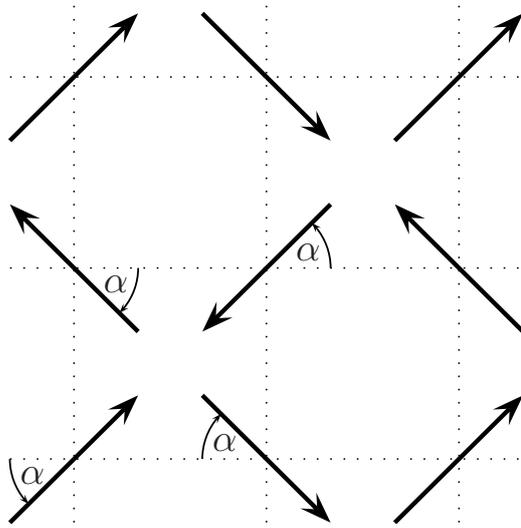


Abbildung 5.1: Neun streufeldgekoppelte Dipole in quasi antiferromagnetischer Anordnung auf einem Quadratgitter. Die Dipole nehmen zu den Hauptachsen des Gitters einen Winkel α ein. Der Winkel ist abwechselnd positiv und negativ (gegen und im Uhrzeigersinn). Der Winkel α ist für vier Dipole eingezeichnet, die restlichen ergeben sich analog. Ist α ein Vielfaches von $\pi/2$, so ergeben sich quasi antiferromagnetische Ketten. Die Gesamtenergie des Systems ist unabhängig von α .

wobei k_B die Boltzmann-Konstante und T eine vorher festgelegte Temperatur ist, so wird der neue Zustand trotz der höheren Energie akzeptiert. Nimmt man eine Boltzmann-Statistik für die Besetzung der Zustände A und B an, so zeigt man leicht, daß der Metropolis Algorithmus das detaillierte Gleichgewicht erfüllt. Das bedeutet, daß der Metropolis-Algorithmus die Zustände unterschiedlicher Energie nach der Boltzmann-Statistik besetzt. Mit einer vorher festgelegten Periode wird der momentane Zustand des Systems sowie dessen Energie abgespeichert. Darüber hinaus ist es möglich, sämtliche Paarwechselwirkungsenergien zu speichern, da jegliche Energien im Speicher abgelegt werden. Dieses ist zwar speicherintensiv, erhöht aber deutlich die Effizienz des Algorithmus. Die Simulationen wurden für unterschiedliche Gittersymmetrien und unterschiedliche Multipolmomente durchgeführt.

5.1.2 Simulation dipolgekoppelter Teilchen

Die Dipol-Dipol-Wechselwirkung ist die niedrigste Ordnung der Wechselwirkung, die für polarisierte Materie auftritt. Da sie das Verhalten magnetischer oder ferroelektrischer Körper maßgeblich beeinflussen kann, ist sie Gegenstand unzähliger Experimente. Dipolgekoppelte Systeme bieten damit die Möglichkeit den Monte Carlo-Algorithmus zu testen und mit bekannten Ergebnissen zu vergleichen. Andererseits werden die Ordnungsphänomene durch die Dipolwechselwirkung falsch interpretiert, insbesondere wenn Dipole in Kombination mit Oktupolen auftreten [81]. Aus diesem Grund wird im folgenden Abschnitt auf die dipolinduzierte Ordnung eingegangen.

Der Grundzustand von Dipolen auf einem zweidimensionalen Quadratgitter zeigt quasi antiferromagnetische Ordnung. Dieser Zustand kann zum Beispiel durch antipar-

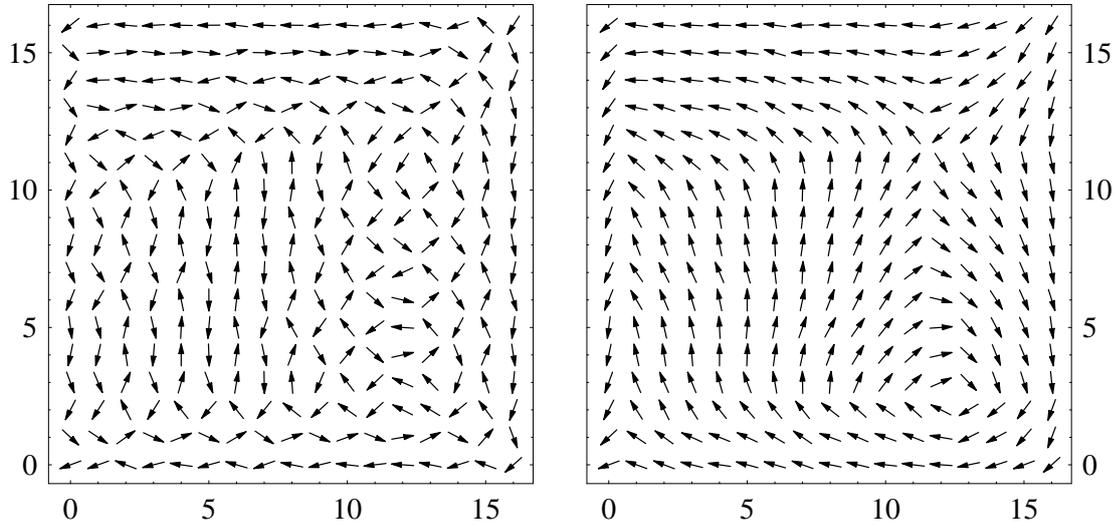


Abbildung 5.2: Die quasi antiferromagnetische Ordnung von Dipolen auf einem Quadratgitter als Ergebnis einer Monte Carlo-Simulation (links). Wenn man die Daten aus dem linken Bild der Transformation aus Gl. 5.3 unterzieht, ergeben sich die Daten im rechten Bild.

alle Ketten realisiert sein. Eine weitere Möglichkeit ist eine Anordnung von Wirbeln und Antiwirbeln. Dieser Zustand ist in Abb. 5.1 realisiert. In diesem Fall ist $\alpha = 45^\circ$. Parallele Ketten ergeben sich für $\alpha = 0^\circ$.

Offene Randbedingungen führen dazu, daß die Konfiguration am Rand einen geschlossenen Kettenzug ausbildet, der das Streufeld minimiert (Abb. 5.2). Die Ketten am Rand pflanzen sich in abwechselnd antiparalleler Anordnung in das Innere der Probe fort. Es entstehen Domänen. Im Übergangsbereich der Domänen wird oft die Wirbel-Antiwirbel-Konfiguration realisiert, da zwischen zwei Ketten in Richtung 0° und 90° aus Symmetriegründen am einfachsten ein Dipol in 45° Orientierung liegt. Da die Energie für beide Zustände gleich ist, können auch Wirbel-Antiwirbel-Bereiche Domänen ausbilden. Die quasi antiferromagnetische Ordnung, die sich in dem dipolgekoppelten System einstellt, ist in Abb. 5.2 (links) dargestellt. Das rechte Vektorfeld ist eine Eichtransformation, die gemäß De’Bell et al. [34] ausgeführt wurde. Die Transformation erfolgt gemäß

$$\begin{pmatrix} S_x \\ S_y \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} (-1)^{n_y} S_x \\ (-1)^{n_x} S_y \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

wobei n_x und n_y die ganzzahligen Koordinaten (also in Einheiten der Gitterkonstanten) der Dipole auf dem Quadratgitter sind. Die Eichtransformation überführt eine ferromagnetische in eine antiferromagnetische Ordnung (und umgekehrt), welche für einen Betrachter leichter zu erkennen ist.

In der unendlich ausgedehnten Ebene sind alle Winkel α gleichberechtigt, da die Energie unabhängig von α ist [34]. Dieses Verhalten tritt bereits bei der Anordnung aus Abb. 5.1 zutage, da gleichviele Wirbel wie Antiwirbel in symmetrischer Anordnung auftreten. Betrachtet man nur vier Dipole auf den Ecken eines Quadrates, so ist die Energie nicht mehr unabhängig vom Winkel α . Der Wirbel ist der Zustand mit der niedrigsten Energie. Die Energie $E_4(\alpha)$ als Funktion des Winkels α ist

$$E_4(\alpha) = c_1 \sin 2\alpha - c_2, \quad (5.4)$$

wobei c_1 und c_2 positive Konstanten sind. Für $\alpha = 0$ liegen horizontale für $\alpha = 90^\circ$ vertikale Ketten vor. Der Antiwirbel wird für $\alpha = 45^\circ$ sowie $\alpha = 225^\circ$ realisiert. Bei $\alpha = 135^\circ$ und $\alpha = 315^\circ$ nimmt das System den Wirbelzustand ein. Bei einer Koordinatentransformation um 45° , die dem Wirbelzustand den Winkel α' zuweist, geht die Funktion $\sin 2\alpha$ aus Gl. 5.4 in $\cos 2\alpha'$ über. Es kann $\cos 2\alpha'$ in $\cos^2 \alpha'$ überführt werden. Der Antiwirbelzustand ist um 90° verschoben, so daß die Energie des Antiwirbels proportional $\sin^2 \alpha'$ ist. Mit $\sin^2 \alpha' + \cos^2 \alpha' = 1$ ist die Summe der Energie aus Wirbel und Antiwirbel unabhängig von α' . Eine weitere Eigenschaft, welche die Isotropie des Systems widerspiegelt, ist die Tatsache, daß eine Auslenkung des zentralen Dipols in Abb. 5.1 aus der Lage mit dem Winkel α um einen Winkel φ für alle Winkel α die Gesamtenergie in gleicher Weise ändert.

Sind die Dipole auf einem zweidimensionalen Dreiecksgitter angeordnet, so sind antiparallele Ketten als Folge der Gittersymmetrie energetisch nicht die günstigste Konfiguration. Der energetische Grundzustand besteht aus Wirbeln, die sich über viele Gitterkonstanten erstrecken können. Es entstehen größere Bereiche, in denen eine quasi ferromagnetische Ordnung zu beobachten ist [35].

5.1.3 Simulation quadrupolar gekoppelter Teilchen

Der Quadrupol ist ein Tensor zweiter Stufe und erlaubt damit deutlich mehr Variationen als der Dipol. In Kapitel 4.1 wurde gezeigt, daß homogen polarisierte Teilchen kein Quadrupolmoment besitzen. Zweidomänige Teilchen können jedoch ein Quadrupolmoment aufweisen [41]. In Ref. [41] wird eine in der Ebene magnetisierte Kreisscheibe mit einer uniaxialen Anisotropie angenommen. Die Anisotropie erzwingt zwei 180° Domänen, die jeweils einen Halbkreis einnehmen. Eine derartige Konfiguration hat kein Dipolmoment. Für eine Kreisscheibe der Höhe h mit dem Radius ϱ berechnet sich das Quadrupolmoment zu $Q_{22} = Q_{2-2}^* = i \sqrt{\frac{8}{3}} \varrho^3 h$. Neben magnetischen oder ferroelektrischen Körpern finden sich in der Natur viele Beispiele für Systeme, die quadrupolar wechselwirken. Dieses können unter anderem CO_2 , N_2 , H_2 -Moleküle oder elektrisch geladene elliptische Kolloide sein; in allen diesen Fällen ist das Quadrupolmoment ausschließlich durch Q_{20} gegeben. Ist das Quadrupolmoment das niedrigste

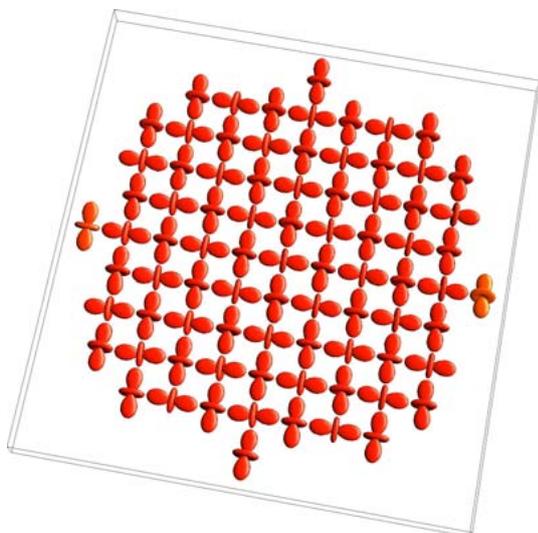


Abbildung 5.3: Monte Carlo-Simulation von axialen Quadrupolen auf einem Quadratgitter. Nächste Nachbarn nehmen zueinander einen Winkel von 90° ein, die günstigste Anordnung der Zwei-Teilchen Wechselwirkung. Übernächste Nachbarn bilden einen Winkel von 45° . Dieses ist energetisch immer noch sehr günstig. Die Folge ist ein energetisch sehr stabiler Grundzustand.

nicht verschwindende Multipolmoment, wird dieses die Ordnung des Systems bestimmen.

Im folgenden Abschnitt wird die Wechselwirkung von Quadrupolen mit dem Moment Q_{20} untersucht. Hält man sich das CO_2 -Molekül als Beispiel vor Augen, so ist klar, daß eine axiale Anordnung energetisch ungünstig ist, dieses ist sogar die ungünstigste Anordnung [48]. Die Ladung ist axial angeordnet. An den Enden (Ort der Sauerstoffmoleküle) befindet sich jeweils eine negative Ladung, während die Mitte (Ort des Kohlenstoffatoms) die doppelte positive Ladung trägt. Um die Energie von zwei wechselwirkenden Molekülen A und B zu minimieren, sollte die negative Ladung von Teilchen A auf die positive von Teilchen B weisen. Dieses ist der Fall, wenn die Teilchen zueinander einen rechten Winkel einnehmen und ein „T“ bilden. Es ist naheliegend, daß sich eine derartige Konfiguration auf einem Quadratgitter leicht realisieren läßt. Die Energie dieser Anordnung ist derart günstig, daß sie sich in Monte Carlo-Simulationen sehr schnell einstellt und wie in Abb. 5.3 kaum Unordnung aufweist.

Im Gegensatz zum zweidimensionalen Quadratgitter zeigen Quadrupole auf einem ebenen Dreieckgitter starke Frustration. Ordnungsphänomene von N_2 und H_2 Molekülen sind im Bereich der Physikalischen Chemie vielfach untersucht worden [37, 38, 82, 83, sowie die Zitate darin]. Die Ergebnisse des Monte Carlo-Algorithmus können mit den früheren Resultaten aus *Mean Field*-Methoden [82] und Monte Carlo-Rechnungen [38] verglichen werden. Die Ordnung, die sich aus den Monte Carlo-Rechnungen ergibt [81], stimmt gut mit den bereits bekannten überein. Sind die Quadrupole frei in drei Dimensionen drehbar, so stellt sich eine „Windradkonfiguration“ ein. Als Zentrum stellt sich ein Quadrupol senkrecht zur Ebene, während die sechs nächsten Nachbarn in der Ebene liegen (Abb. 5.4). Jeder Multipol in der Ebene hat

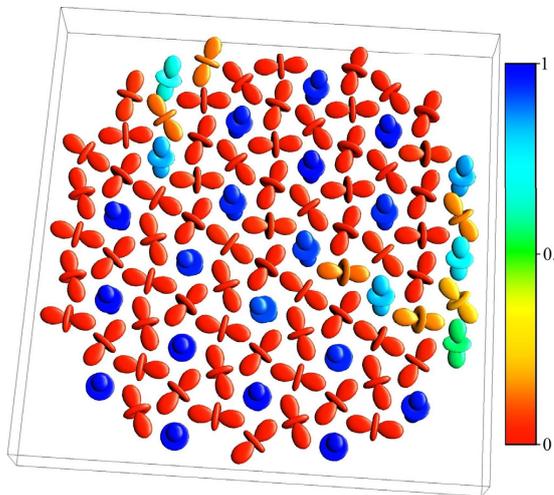


Abbildung 5.4: Monte Carlo-Simulation von axialen Quadrupolen auf einem Dreiecksgitter. Es ist keine langreichweitige Ordnung möglich, bei der nächste Nachbarn bezüglich der Verbindungsline einen Winkel von 90° einnehmen. Die günstigste Konfiguration besteht aus „Windrädern“. Die blau eingefärbten Quadrupole bilden die Achse, die rot eingefärbten die Flügel des „Windrades“. Die Einfärbung wird durch die quadratische z -Komponente bestimmt. Ist θ der Polarwinkel des axialen Quadrupols, so wird $\cos^2 \theta = 0$ *rot*, $\cos^2 \theta = 1$ *blau* eingefärbt [81].

zwei senkrechte Nachbarn und vier Nachbarn in der Ebene. Es gehören somit vier Quadrupole zu einer Einheitszelle, von denen einer senkrecht zur Ebene ausgerichtet ist. Betrachtet man nur die Wechselwirkung mit dem zentralen Moment, sollten die äußeren radial nach innen zeigen, um jeweils eine „T“-Konfiguration zu bilden. Da aber die Wechselwirkung der radial ausgerichteten Quadrupolmomente untereinander ungünstig ist, versuchen diese ihrerseits eine „T“-Konfiguration einzunehmen und drehen deshalb kollektiv aus der radialen Ausrichtung. Die niedrigste Energie als Funktion des Drehwinkels kann analytisch berechnet werden. Ein Vergleich dieser Rechnung mit der Winkelstatistik aus der Monte Carlo-Simulation zeigt Abb. 5.5. Berechnet wurde die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung in einer Einheitszelle. Der senkrechte Quadrupol in der Mitte der „Windradkonfiguration“ ist starr. Aus Symmetriegründen wurde für die Rechnung angenommen, daß sich die äußeren Quadrupole um den gleichen Winkel φ drehen; nur dann bleibt die Nahordnung erhalten. Für $\varphi = 0^\circ$ sind die Quadrupole radial ausgerichtet. In diesem Fall ist die Wechselwirkung mit dem Zentralquadrupol am günstigsten. Die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung der äußeren Quadrupole ist für $\varphi = 42.9^\circ$ ideal. Die Gesamtenergie wird durch die Wechselwirkung in der Ebene bestimmt und ist für $\varphi = 38.8^\circ$ minimal. In der Simulation findet man Winkel, die geringfügig größer als der berechnete sind (Abb. 5.5 rechts). Da in Abb. 5.4 zwei Domänen mit unterschiedlichem Drehsinn existieren, entsteht in der Winkelstatistik ein weiterer Häufungspunkt bei $\varphi = 22^\circ = 60^\circ - 38^\circ$.

Unerwähnt in den früheren Arbeiten sind die Domänenwände, welche in diesem System zu beobachten sind. Dieses liegt zum Teil daran, daß vergleichsweise kleine Systeme im Bereich von 3×3 Einheitszellen untersucht wurden. Da in Ref. [38] periodische

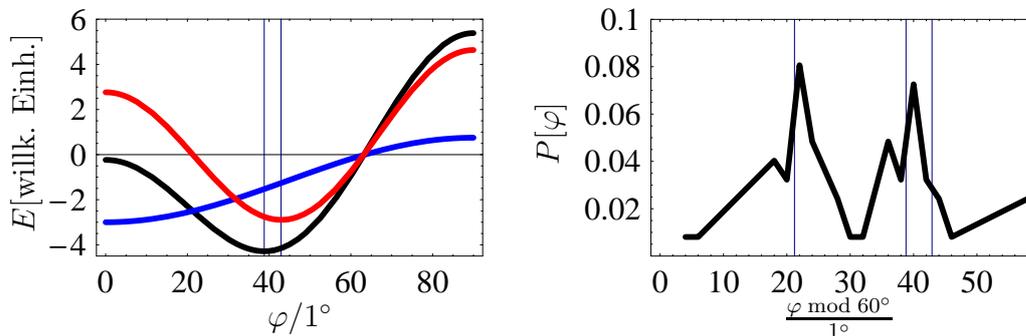


Abbildung 5.5: Vergleich des analytisch berechneten idealen Winkels der „Windradkonfiguration“ (links) mit der Winkelstatistik aus der Monte Carlo-Simulation (rechts). In einer Einheitszelle wurde analytisch die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung als Funktion des Drehwinkels φ berechnet: Die Wechselwirkung mit dem zentralen Quadrupol (—), die ebenen Quadrupole untereinander (—) und die Gesamtenergie (—). Der theoretisch optimale Winkel ist $\varphi = 38.8^\circ$. Die Monte Carlo-Simulation zeigt einen Häufungspunkt bei einem etwas größeren Winkel. Eine zweite Domäne führt zu einem weiteren Häufungspunkt bei $\varphi = 22^\circ$ (vgl. Text).

Randbedingungen eingesetzt wurden, können sich Domänenwände nur schwer oder gar nicht ausbilden. Die *Mean Field*-Rechnungen aus Ref. [82] lassen grundsätzlich keine Domänen zu. Im Gegensatz zum Quadratgitter bilden sich im Dreieckgitter sehr leicht Domänen. Dieses liegt zum einen an den vielen Möglichkeiten die „Windradkonfiguration“ auf dem Dreieckgitter zu realisieren, zum anderen an der energetisch sehr günstigen Domänenwand. Der senkrechte Quadrupol kann jeden der vier Plätze der Einheitszelle besetzen. Des weiteren gibt es zu jeder Position die Möglichkeit eines positiven oder negativen Drehsinns für die Quadrupole in der Ebene. Insgesamt ergeben sich acht Möglichkeiten, im Gegensatz zu zwei Möglichkeiten auf dem Quadratgitter. Die Domänenwand ist in Abb. 5.4 deutlich zu erkennen. Sie verläuft von links oben nach rechts unten und teilt die Probe in zwei halbkreisförmige Domänen. Die Wand selbst ist eine Kette aus „T“-Konfigurationen, unter Vernachlässigung der angrenzenden Domänen die günstigste Anordnung. Wie in der Skizze von Abb. 5.6 zu erkennen ist, wird die „Windradkonfiguration“ an der Domänenwand nur geringfügig gestört, so daß der Energieverlust pro Wandlänge sehr gering ist.

Neben frei im Raum drehbaren Quadrupolen, wie sie zum Beispiel bei H_2 , D_2 und N_2 Kristallen auftreten [37, 38, 84–86], kann die Rotation auch auf zwei Dimensionen eingeschränkt sein. Zu den Systemen, die in einem ebenen *XY*-Modell behandelt werden können, zählen unter anderem in der Ebene magnetisierte, zweidomänige Kreisscheiben [41] aber auch Oberflächenadsorbate großer, organischer Moleküle [16]. Planare, quadrupolare Systeme wurden ebenfalls mittels *Mean Field*-Methoden [82] untersucht,

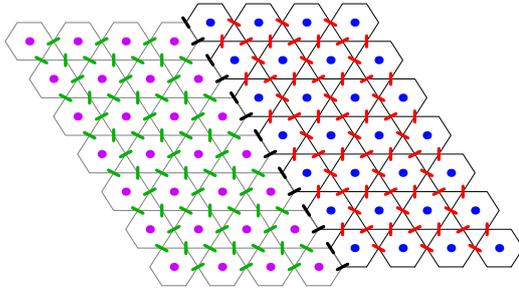


Abbildung 5.6: Skizze zweier Domänen von Quadrupolen auf dem Dreiecksgitter (• und — sowie • und —) in der „Windradkonfiguration“ mit entgegengesetztem Drehsinn. Die Domänen werden durch eine sehr schmale Wand getrennt, welche die energetisch günstigste „T“-Konfiguration realisiert (—). Die Winkelabweichungen der Quadrupole innerhalb der Wand im Vergleich zur Anordnung in der Domäne sind sehr gering, und die Wand ist sehr stabil.

so daß auch hier ein Vergleich mit den Monte Carlo-Rechnungen möglich ist. Eine mögliche Konfiguration planarer Quadrupole zeigt Abb. 5.7. Es stellt sich die vorhergesagte Ordnung [82] mit einem sog. „Fischgrätenmuster“ ein. Die Quadrupole nehmen zueinander Winkel von 90° ein. Der Lagewinkel zum Gitter beträgt 15° , so daß die Quadrupole nicht direkt aufeinander zuweisen. Im Gegensatz zu *Mean Field*-Rechnungen erlauben Monte Carlo-Rechnungen das Auftreten mehrdomäniger Zustände. Im „Fischgrätenmuster“ sind sechs verschiedene Domänen möglich. Von diesen sechs Domänen sind in Abb. 5.7 drei realisiert. Als Domänenwand findet sich zum einen die typische „T“ Struktur wieder, zum anderen tritt eine „> | <“-Figur auf. Der Übergang von der Domäne zur Wand ist energetisch nicht so günstig, wie in der „Windradkonfiguration“.

Der Vergleich dieser theoretischen Ergebnisse mit den experimentellen Befunden aus Ref. [16] zeigt, daß die Moleküle im Experiment entlang der Achsen des dreizähligen Gitters verlaufen und folglich keinen Winkel von 90° einnehmen. Simulationen mit planaren Quadrupolen, welche der Geometrie der Moleküle aus Ref. [16] entsprechen, zeigen die gleiche planare Ordnung wie axiale Quadrupole, wobei die zweidimensionale Struktur angenommen wird, auch wenn eine z -Komponente nicht explizit ausgeschlossen wird. Die Abweichung der Molekülanordnung von der rein quadrupolaren Ordnung könnte ihre Ursache in Multipolmomenten höherer Ordnung oder in einer durch das Substrat induzierten Anisotropie haben. Die Berücksichtigung einer Anisotropie ist im Monte Carlo-Algorithmus problemlos möglich. Sicher ist jedoch, daß sich die experimentellen Daten aus Ref. [16] nicht nur durch ein Quadrupolmoment erklären lassen. Die Abweichungen geben Anlaß zu weiterführenden Rechnungen.

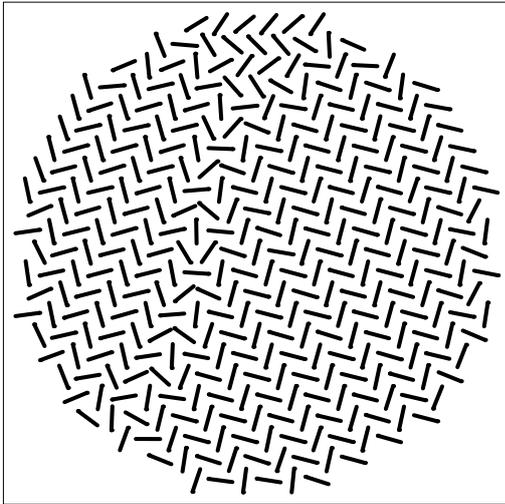


Abbildung 5.7: Monte Carlo-Simulation von Quadrupolen (Q_{20}) im XY -Modell auf einem Dreieckgitter. Es bildet sich ein „Fischgrätenmuster“ aus, in dem paarweise zwei Reihen von Quadrupolen um 90° gegeneinander verdreht sind. Die Quadrupole bilden einen Winkel von 15° zu den Gitterachsen. Man erkennt deutlich zwei Domänen; eine dritte am oberen Rand ist schwach ausgeprägt.

5.1.4 Simulation oktopolar gekoppelter Teilchen

Im Falle rotationssymmetrischer, polarisierter Teilchen, die eine Polarisationskonfiguration mit Inversionszentrum aufweisen, ist das Oktopolmoment die nächst höhere Korrektur zum Dipolmoment¹. Klassische Systeme mit oktopolarer Wechselwirkung sind die Modelle aus Abb. 5.8. Diese bestehen aus Kompaßnadeln, die drehbar gelagert sind. Derartige Modelle werden in Schulen und an Universitäten benutzt, um den Ferromagnetismus und die Entstehung von Weißschen Bezirken auf atomarer Ebene zu veranschaulichen. Die ferromagnetische Ordnung ist ein quantenmechanischer Vielteilcheneffekt, der kein klassisches Äquivalent besitzt. Folglich muß die Interpretation der makroskopischen Ordnung der Kompaßnadeln als ferromagnetische Ordnung falsch sein. Die Kompaßnadeln wechselwirken nur aufgrund ihres Magnetfeldes miteinander, nicht mittels einer quantenmechanischen Austauschwechselwirkung. Die Ordnung, die sich als Folge der Magnetisierung einstellt, kann, wie ein Vergleich mit Kap. 5.1.2 zeigt, nicht ausschließlich durch die Dipolwechselwirkung hervorgerufen werden. Sowohl auf dem Dreieckgitter als auch auf dem Quadratgitter ordnen sich die Nadeln in Ketten an, die entlang den Gitterachsen verlaufen. Auf dem Dreieckgitter sind die Ketten meist parallel, während sich auf dem Quadratgitter antiparallele Ketten ausbilden. Monte Carlo-Simulationen mit Oktopolen zeigen für diese Gittersymmetrien ein vergleichbares Verhalten. Es stellen sich Ketten ein, die auf dem Dreieckgitter parallel und auf dem Quadratgitter antiparallel verlaufen. Die Wirbel-Antiwirbel-Konfiguration der Dipolwechselwirkung wird weder in der Simulation noch im Modell beobachtet. In den obigen Modellen ist die Ausdehnung der Nadeln im Vergleich zum Gitterabstand so groß, daß die Ordnung durch Multipolmomente größer als das Dipolmoment

¹Eine Ausnahme ist der Würfels, bei dem auch der Oktopol verschwindet.

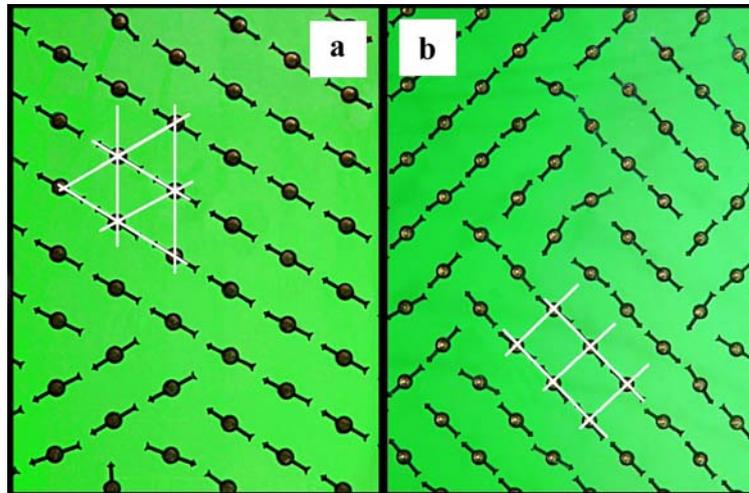


Abbildung 5.8: Photographien zweier Kompaßnadel-Modelle. Die Kompaßnadeln sind beweglich gelagert und in der Ebene drehbar. Links sind sie auf einem Dreiecksgitter, rechts auf einem Quadratgitter angeordnet.

bestimmt wird², wobei auch Momente jenseits des Oktopolmoments, die jedoch in Bezug auf Ordnungsphänomene in dieser Arbeit nur qualitativ (s. Kap. 5.2) untersucht wurden, eine Rolle spielen. Ist das Verhältnis von Abstand R der Nadeln zu ihrer Ausdehnung h etwa $R/h \approx 1.3$ und wird die Form durch einen Zylinder genähert, so ist der dominante Energieterm in der Paarwechselwirkung immer noch die Dipol-Dipol-Wechselwirkung. Die Energie ist aber unabhängig von der quasi antiferromagnetischen Anordnung (vgl. Kap. 5.1.2). Durch das zusätzliche Oktopolmoment wird die Energie der Kette um ca. 50% abgesenkt. Die Energie der anderen Anordnungen ändert sich nur geringfügig. Dieses Verhalten wird durch das Dotriakontapolumoment begünstigt, welches die Energie der Kette um weitere 10% absenkt. Entscheidend für die Ordnung im Kompaßnadel-Modell ist somit nicht nur die Wechselwirkungsenergie der Multipolmomente, sondern auch das anisotrope Verhalten der Wechselwirkung. Eine der möglichen Konfigurationen der Dipol-Dipol-Wechselwirkung wird durch die Momente höherer Ordnung selektiert.

Da das Oktopolmoment in vielen Fällen die nächsthöhere Korrektur zur dipolaren Wechselwirkung ist, wird die oktopolare Wechselwirkung herangezogen, um superparamagnetische und superferromagnetische Phänomene [87–90] zu erklären, die sich nicht auf die ausgiebig studierte dipolare Wechselwirkung zurückführen lassen

² Verbesserte, mechanische Modelle, die Kompaßnadeln mit Ausdehnungen deutlich kleiner als der Gitterabstand benutzen, zeigen auch die für die Dipol-Dipol-Wechselwirkung typische Wirbel-Antiwirbel-Konfiguration.

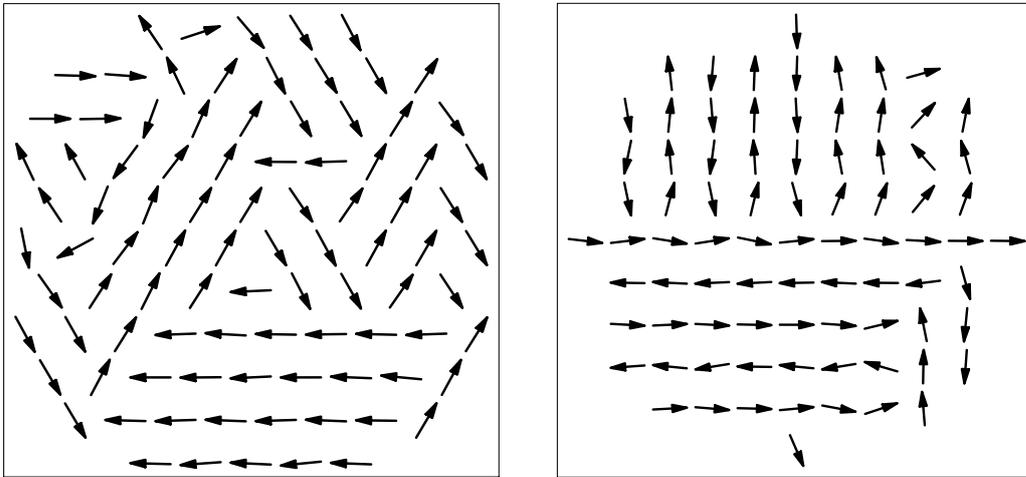


Abbildung 5.9: Monte Carlo-Simulation von Oktupolen auf einem Dreieckgitter (links) sowie einem Quadratgitter (rechts) [81]. Es stellt sich eine Ordnung ein, die vergleichbar zu der in den Modellen aus Abb. 5.8 ist.

[34–36, 40]. In Ref. [40] wird über den Einfluß von Momenten höherer Ordnung spekuliert, die dann aber ohne Begründung in Form einer Anisotropie behandelt werden. Dieses Vorgehen wird nicht präzise begründet, ist aber insofern berechtigt, als in der Abb. 5.8 Domänen zu erkennen sind, welche Vorzugsrichtungen aufweisen. Diese Symmetriebrechung ist als Anisotropie zu interpretieren. Auf die durch Oktupolmomente induzierte Anisotropie wird in Kap. 6 eingegangen. In einigen Fällen werden Oktupolkorrekturen behandelt [30, 31, 91]. Die Rechnungen beschränken sich dabei auf sehr spezielle Teilchengemetrien (quasi zweidimensionale Quadrate [31] oder quasi zweidimensionale Kreisscheiben [32])³. Insbesondere sind quadratische Gitter untersucht [32]. Die vorliegenden systematischen Untersuchungen konnten zeigen, daß ein zusätzliches Oktupolmoment die Kettenbildung in dipoldominierten Systemen begünstigt und somit auf einem Quadratgitter superantiferromagnetische, auf einem Dreieckgitter superferromagnetische Ordnung hervorrufen kann.

5.1.5 Simulation hexadekapolar gekoppelter Teilchen

Der Vergleich von Dipol- und Oktupolmoment zeigt, daß beide ein sehr ähnliches Verhalten aufweisen. Der Grundzustand der oktopolaren Ordnung ist, bezogen auf sei-

³ Es sei darauf hingewiesen, daß in der Literatur oft die Rede von Quadrupolkorrekturen ist, auch wenn Quadrupole aus Symmetriegründen verboten sind [31, 91]. Gemeint sind Quadrupole von Dipolen; das sind Oktupole [18]

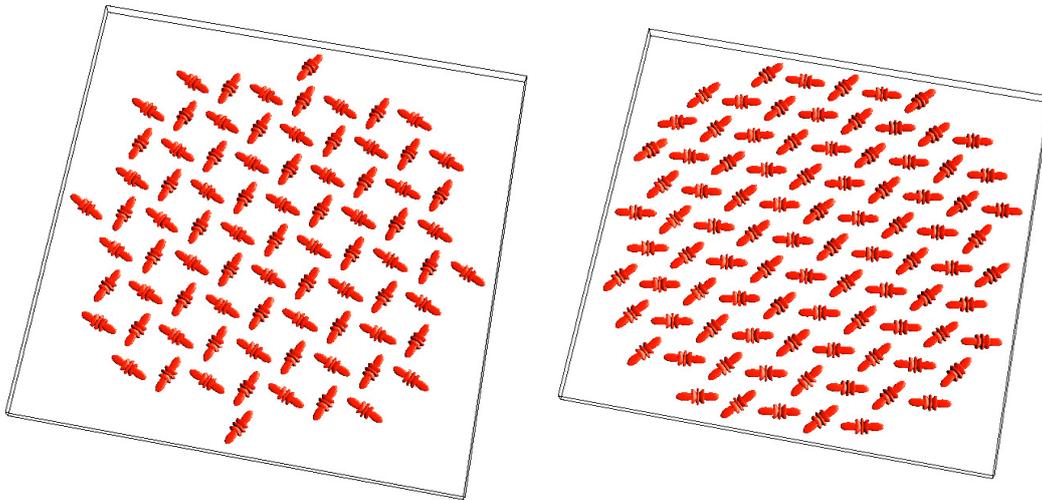


Abbildung 5.10: Monte Carlo-Simulation von Hexadekapolen auf einem Quadratgitter (links) sowie einem Dreieckgitter (rechts). Auf dem Quadratgitter ergibt sich eine „Web“-Struktur. Die Achsen der Momente stehen senkrecht aufeinander. Auf dem Dreieckgitter zeigt sich ein „Fischgrätenmuster“ [81].

ne Symmetrie, eine Teilmenge der möglichen Dipolkonfigurationen. Dieses liegt daran, daß alle Momente mit ungerader Parität eine Kettenbildung ermöglichen. Wie an den Multipolmomenten in Tab. 5.1 zu erkennen ist, nimmt die axiale Streckung der Äquipotentialfläche mit der Ordnung der Momente zu. Je höher also die Ordnung ist, desto günstiger ist die Kettenbildung für Momente mit ungerader Parität. Für Momente mit gerader Parität ist die Wechselwirkung komplizierter. Auch für diese gilt, daß die Streckung der Äquipotentialfläche zunimmt. Dieses bedeutet aber, daß eine Kettenbildung energetisch immer ungünstiger wird. Damit ist aber noch keine Aussage über den energetisch günstigsten Zustand, selbst für die Zwei-Teilchen Wechselwirkung, möglich. Zwar ist für den axialen Quadrupol die „T“-Konfiguration die günstigste, dieses gilt aber nicht für den axialen Hexadekapol, der nach dem Quadrupolmoment das nächste Moment mit gerader Parität ist, da in der Spiegelebene des Potentials (senkrecht auf der Achse des Moments) das gleiche Vorzeichen wie in axialer Richtung zu finden ist. Die „T“-Konfiguration ist damit sogar ausgesprochen ungünstig. Die Ordnung, die sich im Falle der hexadekapolaren Wechselwirkung auf dem Quadrat- und dem Dreieckgitter einstellt, ist in Abb. 5.10 berechnet. Für beide Gittertypen liegt die Struktur in der Ebene, obwohl eine 3D-Anordnung zugelassen ist. Auf dem Quadratgitter bildet sich eine „Web“-Struktur, die auch als Wirbel-Antiwirbel-Konfiguration aufgefaßt werden kann. Die Achsen benachbarter Momente nehmen dabei zueinander einen Winkel von 90° ein. Auf dem Dreieckgitter bildet sich ein „Fischgrätenmuster“ aus, und der

Winkel zwischen den Achsen der Momente beträgt 41° . Für beide Gitter stimmen die Winkel der Momente gut mit analytisch berechneten überein. Auf dem Quadratgitter beträgt der Winkel zwischen der Achse des Moments und der Gitterrichtung 22.3° , auf dem Dreieckgitter 9.5° .

Durch Kombination von Hexadekapol- und Quadrupolmoment kann somit der Winkel zwischen den Momenten variiert werden. Die charakteristische Ordnung, „Web“- und „Fischgrätenmuster“, bleibt dabei erhalten.

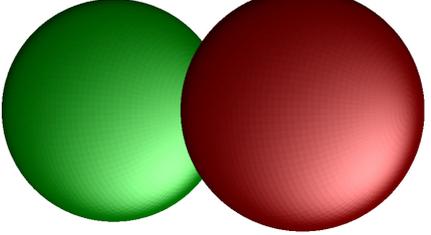
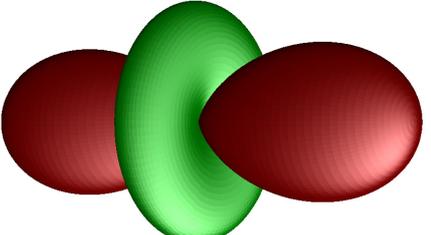
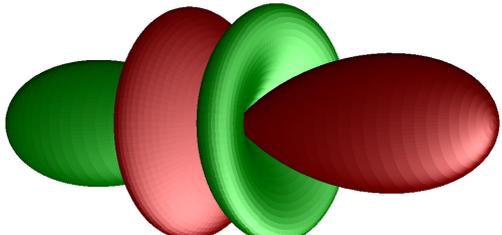
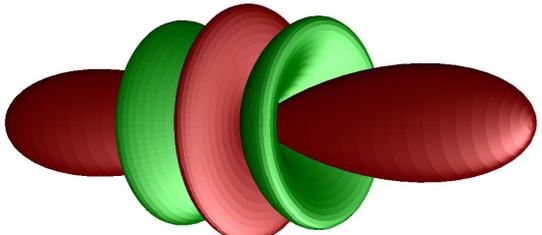
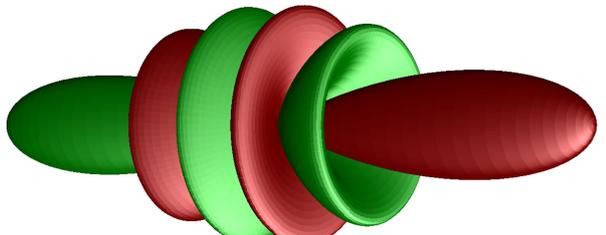
5.2 Allgemeine Aussagen zu Ordnungsphänomenen in multipolar gekoppelten Systemen

Es läßt sich zusammenfassend sagen, daß in streufeldgekoppelten Systemen Muster zu beobachten sind. Die sich einstellenden Muster sind stark von der Symmetrie auftretender Multipolmomente, den Rotationsfreiheitsgraden und der Symmetrie des zugrundeliegenden Gitters abhängig. Je höher die Multipolordnung ist, desto geringer ist die Reichweite der Wechselwirkung; für hohe Ordnungen muß praktisch nur noch die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung berücksichtigt werden. Das bedeutet aber auch, daß es für Systeme mit überwiegend hohen Multipolkomponenten keine langreichweitige Wechselwirkung gibt, welche die Domänenbildung unterstützt, wie es für die dipolare Wechselwirkung der Fall ist. Durch Ausbildung von Domänen wird in einem System mit kurzreichweitiger Wechselwirkung die innere Energie des Systems nur geringfügig abgesenkt. Die Energiezunahme durch die Domänenwand kann sogar überwiegen. Thermodynamisch ist dann ein mehrdomäniger Zustand nur durch die Zunahme der Entropie begünstigt. Mit zunehmender Multipolordnung wird somit die Wahrscheinlichkeit für einen mehrdomänigen Zustand fallen. Für Momente mit ungerader Parität wird dieses durch die Tatsache unterstützt, daß die Kettenbildung mit zunehmender Multipolordnung immer günstiger wird. Im Gegensatz dazu ist eine axiale Ausrichtung der Multipole mit gerader Parität zunehmend verboten. Die Äquipotentialfläche senkrecht zur Achse wird dabei immer komplexer und weist immer weitere Extrema auf. Wenn in axialer Richtung ein positives Extremum (vgl. Abb. 5.10) vorliegt, so ist das angrenzende negative Extremum das vom Betrage her größte mit umgekehrtem Vorzeichen. Obwohl also eine axiale Ausrichtung energetisch verboten ist, wird diese dennoch im Grenzwert hoher Multipolordnungen bei axialen Multipolen angenommen. Ist das Auftreten bestimmter Multipolmomente sowie deren Stärke gezielt beeinflussbar, kann eine Ordnung erzwungen und im Detail sogar der auftretende Winkel manipuliert werden.

Insgesamt sollte in dichtgepackten Anordnungen polarisierter Materie der Einfluß

höherer Multipolmomente zu beobachten sein. Der Einfluß wird sich einerseits in der Ordnung der Systeme bemerkbar machen. Die sich einstellende Ordnung kann mit ortsauflösenden Methoden wie der Rasterelektronenmikroskopie mit Polarisationsanalyse, magnetischer bzw. elektrischer Rasterkraftmikroskopie oder spinpolarisierter Rastertunnelmikroskopie untersucht werden. Andererseits wird der Einfluß unterschiedlicher Multipolmomente auch in thermodynamischen Größen wie der Suszeptibilität oder Wärmekapazität nachweisbar sein. Daß oktopolare Systeme temperaturabhängig einen Phasenübergang zweiter Ordnung ausweisen, konnte mittels Monte Carlo-Rechnungen bereits gezeigt werden [39, 81]. Darüber hinaus werden die Multipole unterschiedlicher Ordnung zu einer Anisotropie in Abhängigkeit von der Gittersymmetrie führen. Dieses wird in Kap. 6 untersucht.

Tabelle 5.1: Axiale Multipole der Ordnung $l = 1$ bis $l = 5$. Dargestellt sind die Potentiale, die den Kugelflächenfunktionen Y_{l0} entsprechen. Die Oberfläche der Kugelflächenfunktionen kann als Äquipotentialfläche des Multipols angesehen werden. Flächen *roter* Einfärbung entsprechen positivem Potential, also einem magnetischen Nordpol. Die *grün* eingefärbten Flächen sind vom Betrag her gleich, aber negativ, gehören also zu einem magnetischen Südpol.

| | Dipol | Quadrupol | Oktopol | Hexadekapol | Dotriakontapol |
|----------|---|---|---|---|---|
| Q_{10} |  |  |  |  |  |
| Q_{20} | | | | | |
| Q_{30} | | | | | |
| Q_{40} | | | | | |
| Q_{50} | | | | | |

Kapitel 6

Multipolinduzierte Anisotropie in zweidimensionalen Gittern

Die Geometrie und der Polarisationszustand beeinflussen die Eigenschaften des Streufeldes magnetischer oder ferroelektrischer Teilchen. In einer Multipolentwicklung kann sich zeigen, daß das Dipolmoment von gleicher Größenordnung wie höhere Momente sein kann¹. Im Falle der zweidomänigen Kreisscheibe (Kap. 5.1.3) ist das Dipolmoment sogar Null, und die niedrigste, nicht verschwindende Ordnung ist das Quadrupolmoment [41]. Die Wechselwirkung höherer Ordnung besitzt eine andere Winkelabhängigkeit bezüglich der relativen Orientierung als die Dipol-Dipol-Wechselwirkung. Als Folge erzwingen die höheren Momente im Grundzustand unterschiedliche Ordnungen auf verschiedenen Gittersymmetrien. In diesem Kapitel soll darüber hinaus gezeigt werden, daß Multipolmomente eine Anisotropie induzieren. Die innere Energie des Systems ist von der Lage der Multipolmomente relativ zu den Gitterachsen abhängig. Die magnetostatische Anisotropie soll dabei analog zur magnetischen Anisotropie² definiert werden als die Änderung der Energie homogen ausgerichteter Multipole, angeordnet auf einem Gitter, als Funktion ihrer Orientierung. Anisotropie kann dabei einen ferromagnetischen Phasenübergang verschieben oder den Übergang gar erst ermöglichen. So zeigten Mermin und Wagner [61, 92], daß in einem ein- oder zweidimensionalen isotropen Heisenbergmodell mit einer Wechselwirkung endlicher Reichweite kein (Anti-) Ferromagnetismus existiert. Eine geringe Anisotropie ändert dieses. Da eine Anisotropie die Ordnung in einem System wechselwirkender Teilchen, aber auch mögliche ferromagnetische oder superparamagnetische [87, 93, 94] Phasenübergänge beeinflussen kann, wird der Monte Carlo Algorithmus leicht abgeändert genutzt, um die Anisotropie verschiedener Multipole auf unterschiedlichen Gittersym-

¹Ein Beispiel ist $Q_{10} \approx Q_{20}$.

²Als magnetische Anisotropie kann z. B. die magnetokristalline Anisotropie genannt werden.

metrien zu berechnen. Der Einfachheit halber beschränken sich diese Rechnungen auf axiale Multipole vom Typ Q_{l0} . Zwar sind die axialen Multipole eine spezielle Klasse mit einer sehr speziellen Geometrie, doch weisen sie die Charakteristika der Multipolordnung, die Vorzeichenwechsel im Potential, auf. So ist der Grundzustand axialer Quadrupole und derjenige der Quadrupole einer zweidomänigen Kreisscheibe auf einem Quadratgitter geometrisch identisch. Axiale Multipole geben als Spezialfall des allgemeinen Multipols die Möglichkeit, Vorhersagen über eine zu erwartende Anisotropie zu machen.

6.1 Anisotrope Energie axialer Multipole

Die Anisotropie wurde für die ersten fünf axialen Multipole berechnet. Die Multipole vom Dipol bis zu Dotriakontapol sind in Tab. 5.1 aufgelistet. Diese Multipole werden in der Ebene auf zweidimensionalen Gittern endlicher Ausdehnung angeordnet. Die Momente werden kohärent von 0° bis 90° gedreht und die Gesamtenergie des Systems berechnet. Die Rechnungen sind für alle fünf Multipole aus Tab. 5.1 für fünf Gittersymmetrien ausgeführt. Die untersuchten Gittersymmetrien sind

1. Rechteckgitter
2. Quadratgitter
3. Dreieckgitter
4. Ammann-Beenker-Gitter [95]
5. Penrose-Gitter [96]

Die ersten drei Gittertypen sind Bravais-Gitter, welche die Ebene periodisch parkettieren. Die beiden letzteren Gitter sind nichtperiodische Parkettierungen der Ebene. Ausschnitte dieser Parkettierungen sind in Abb. 6.1 gezeigt. Die Reihenfolge, in der die Gitter angeführt sind, ergibt sich nach der Anzahl der äquivalenten Spiegelachsen. Ein Rechteck hat zwei Spiegelachsen. Das Rechteck ist bezüglich der Spiegelachsen nicht identisch. Das bedeutet, daß sich das Rechteck nicht selbst überdeckt, wenn man die eine Spiegelachse durch Rotation in die zweite überführt. Diese Eigenschaft erfüllen paarweise zwei der vier Spiegelachsen des Quadrates, weshalb es an Position zwei aufgeführt ist. In der oktagonalen Parkettierung finden sich Achtecke. Diese haben zwar acht Spiegelachsen, von denen aber nur paarweise vier äquivalent sind. Ein Fünfeck weist nur fünf Spiegelachsen auf. Diese sind aber alle äquivalent. Es gibt noch weitere

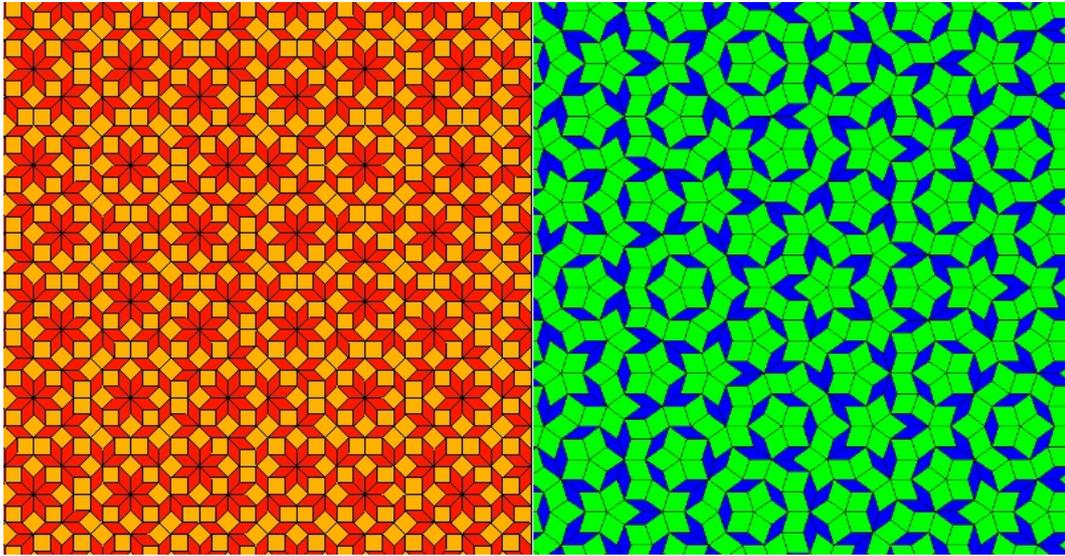


Abbildung 6.1: Nichtperiodische Parkettierungen: links oktagonal nach Ammann-Beenker [97], rechts pentagonal nach Penrose [98].

nichtperiodische Parkettierungen höherer Symmetrie³, die im Folgenden jedoch nicht untersucht werden.

Die berechneten winkelabhängigen Energien lassen sich als Reihenentwicklung schreiben. Eine mögliche Entwicklung erfolgt nach Sinusfunktionen

$$E(\varphi) = E_{\min} + \sum_{k=1}^{\infty} c_k \sin^2 k\varphi. \quad (6.1)$$

Die Multipole nehmen dabei den Winkel φ zur x -Achse ein. Die Anisotropie des Systems spiegelt sich in nicht verschwindenden Entwicklungskoeffizienten c_k wider. Für alle regelmäßigen Gitter zeigt sich, daß bereits sehr wenige Punkte ausreichen, um diejenigen Entwicklungskoeffizienten zu bestimmen, die von Null verschieden sind. Mit den vier Eckpunkten eines Quadrates läßt sich zeigen, daß Dipole auf einem Quadratgitter keine Anisotropie besitzen. Dieses gilt ebenso für Dipole, die auf einem Dreieckgitter angeordnet sind. Betrachtet man die winkelabhängige Energie von Hexadekapolen auf einem Quadratgitter, wie in Abb. 6.2, sind nur zwei Koeffizienten von Null verschieden. Alle weiteren Koeffizienten sind Null im Rahmen der Rechengenauigkeit, d. h. Anzahl der Punkte N multipliziert mit der Maschinengenauigkeit (10^{-16}).

³ Weitere nichtperiodische Parkettierungen sind die Tübinger Dreiecksparkettierung (*tübingen triangle tiling*, **ttt**) mit zehnfacher Symmetrie, die zwölfzählige *Shield*-Parkettierung oder die Danzer-Parkettierung mit vierzehnzähliger Symmetrie.

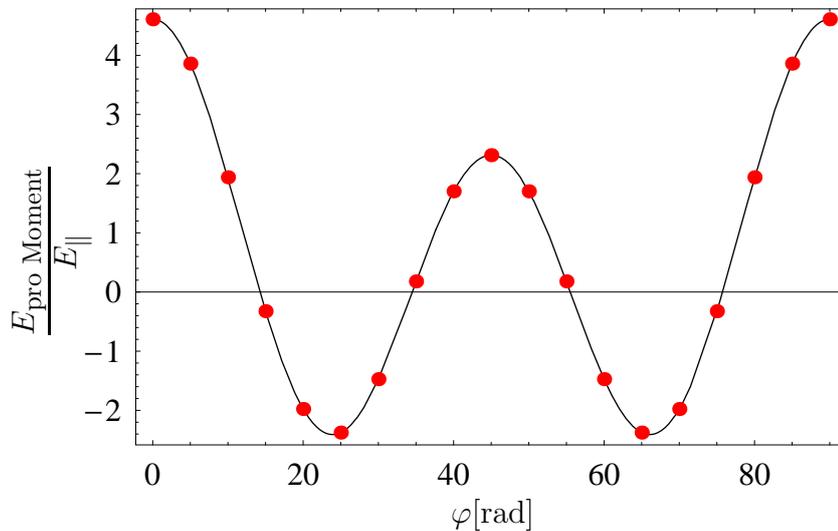


Abbildung 6.2: Winkelabhängige Gesamtenergie von parallelen Hexadekapolen auf einem Quadratgitter, dividiert durch die Anzahl N der Momente und die Wechselwirkungsenergie E_{\parallel} zweier Hexadekapole mit $Q_{40} = 1$, die entlang der x -Achse im Abstand $r = 1$ angeordnet sind. Der berechnete Datensatz (\bullet) läßt sich durch $E(\varphi) = NE_{\parallel}(4.61 - 2.30 \sin^2 2\varphi - 5.81 \sin^2 4\varphi)$ anpassen.

Für aperiodische Gitter ist die Rechnung aufwendiger. Lokal können im Penrose-Gitter wie auch im Ammann-Beenker-Gitter die nächsten Nachbarn asymmetrisch angeordnet sein. Zusätzlich variiert der Abstand der Nachbarn, so daß insbesondere bei Multipolen hoher Ordnung, die mit einer hohen Potenz auf Abstandsänderungen reagieren, eine starke Fluktuation in der lokalen Energie auftritt. Die Energie pro Moment ist also für jedes Moment eine andere und diese können sehr stark voneinander abweichen. Die mittlere Energie des Zustandes in Abb. 6.3 entspricht etwa dem 15-fachen der Paarwechselwirkung E_{\parallel} zweier entlang z paralleler Hexadekapole, die entlang der x -Richtung $r = 1$ voneinander entfernt sind. Lokal schwankt die Energie jedoch von $-148E_{\parallel}$ bis $290E_{\parallel}$. Die Schwankungen sind also deutlich größer als die mittlere Energie. Diese lokale Asymmetrie erzeugt in kleinen Systemen eine zufällige Anisotropie. Für große Stichproben mittelt sich die lokale Unordnung zu Null, und das anisotrope Verhalten der Hexadekapole verschwindet. Die Anisotropie wurde für kreisförmige Ausschnitte aus dem Penrose-Gitter berechnet und in Abb. 6.4 aufgetragen. Da die mittlere Energie subtrahiert wurde, schwanken alle Kurven um Null. Die Schwankungen sind nahezu periodisch und spiegeln die fünfzählige Symmetrie des Gitters wider. Die Lage der Nulldurchgänge schwankt. Dieses ist zum Teil auf den untersuchten Winkelbereich zurückzuführen; da nur ein Winkelbereich $0^\circ < \varphi < 90^\circ$ untersucht wurde, kann die mittlere Energie, welche von den Daten subtrahiert wurde, von der mittleren

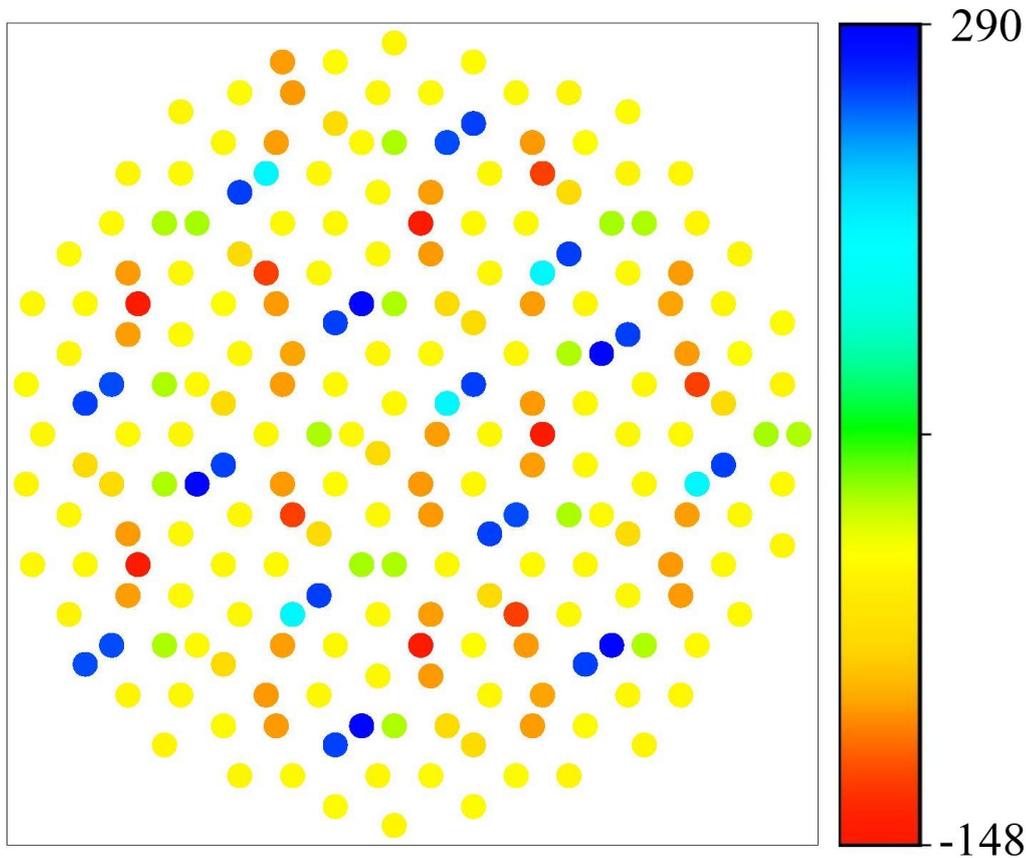


Abbildung 6.3: 219 Hexadekapole Q_{40} auf einem Penrose-Gitter angeordnet. Die Momente sind in die Ebene gedreht und nehmen zur x -Achse einen Winkel von $\varphi = 40^\circ$ ein. Die Energie pro Spin in Einheiten von E_{\parallel} (s. Text zu Abb. 6.2) variiert von $-148E_{\parallel}$ bis $290E_{\parallel}$.

Energie aus Rechnungen mit $0^\circ < \varphi < 360^\circ$ abweichen. Das Vorzeichen der periodischen Schwankungen ändert sich mit der Stichprobengröße; für einen festen Winkel ist die Energie, je nach Stichprobe, positiv oder negativ. Mit steigender Stichprobengröße erkennt man die Tendenz einer abnehmenden Amplitude. Dieses Verhalten ist in Abb. 6.5 gezeigt. Der Trend abnehmender Energieschwankungen ΔE zeigt dabei eine deutliche Abweichung für $N = 1406$ Hexadekapole. In diesem Fall ist eine Stichprobengröße gewählt, bei der sich zufällig alle lokalen Unordnungen nahezu aufheben. Um aufzuzeigen, daß die Anisotropieenergie pro Multipolmoment für Hexadekapole auf einem Penrose-Gitter gegen Null konvergiert, sind also mehrere Rechnungen erforderlich. Dies gilt für alle Multipole von der Ordnung $l \leq 4$. Ein vergleichbares Verhalten zeigt sich für Multipolmomente mit $l \leq 3$ auf dem Ammann-Beenker-Gitter.

Im Gegensatz zu dem aufwendigen Nachweis des Verschwindens der Anisotropie von Multipolmomenten hoher Ordnung l , zeigt sich schnell der dominante Term, so-

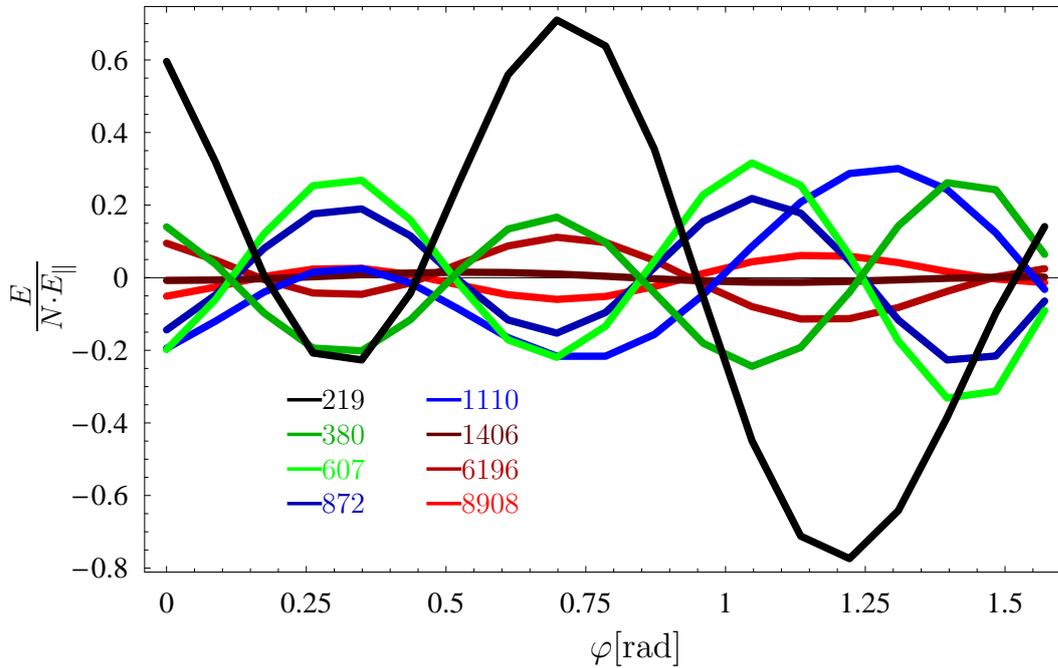


Abbildung 6.4: Winkelabhängige Energie von Hexadekapolen, angeordnet auf einem Penrose-Gitter für verschieden große Stichproben. Von den Daten ist die mittlere Energie subtrahiert. Das Ergebnis ist normiert auf die Anzahl N der beteiligten Momente sowie die Paarwechselwirkung $E_{||}$ zweier Hexadekapole mit $Q_{40} = 1$, die entlang der x -Achse in einem Abstand von $r = 1$ angeordnet sind.

bald eine Anisotropie vorliegt. Für den Hexadekapol und den Dotriakontapol ist der bestimmende Beitrag zur Anisotropie $E(\varphi) - E_{\min} = c_4 \sin^2 4\varphi$. Bereits bei 857 Punkten sind alle weiteren Entwicklungskoeffizienten c_k um 4 Größenordnungen kleiner als c_4 . Diese gilt ebenfalls für c_5 und den Dotriakontapol auf dem Penrose-Gitter bei 1406 Punkten, obwohl für diese Probengröße zu bedenken ist, daß sich die lokale Unordnung global unerwartet gut kompensiert (vgl. Abb. 6.5).

6.2 Symmetrieeigenschaften multipolinduzierter Anisotropie in zweidimensionalen Gittern

Die Ergebnisse aller Rechnungen sind in Tabelle 6.1 zusammengefaßt. Die Angaben zu den nichtperiodischen Gittern sind rot hervorgehoben, um zu verdeutlichen, daß die Resultate nur im Grenzwert großer Stichproben Gültigkeit haben.

Für den Dipol zeigt sich eine uniaxiale Anisotropie auf dem Rechteckgitter. Auf

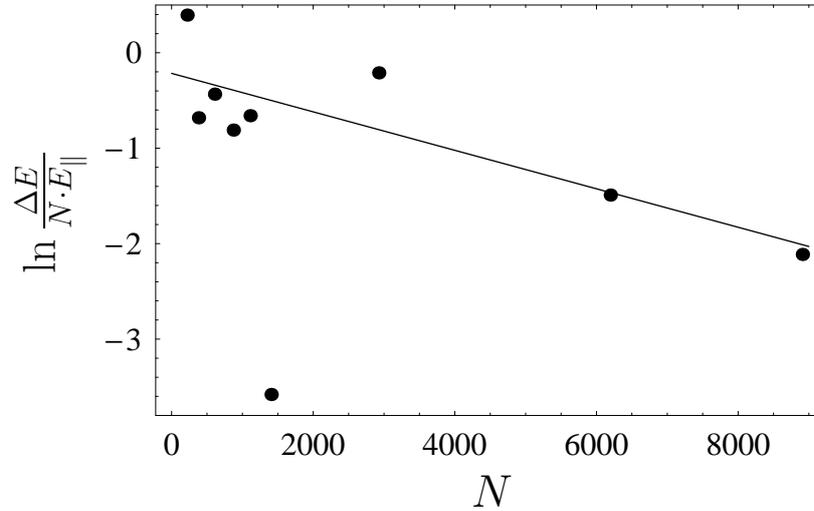


Abbildung 6.5: Winkelabhängige Energieschwankung ΔE von Hexadekapolen, angeordnet auf einem Penrose-Gitter, als Funktion der Stichprobengröße N . Die Normierung der Energie erfolgt analog zu Abb. 6.5. Da die Wechselwirkungsenergie zwischen Hexadekapolen sehr empfindlich auf Variationen des Abstandes reagiert ($E_{\text{ww}} \propto r^{-9}$), führt die Unordnung im Penrosegitter zu Fluktuationen der Energie, wie bei der Stichprobe mit 1406 Hexadekapolen. Abgesehen von dieser Ausnahme ist der Trend zu einem isotropen Verhalten mit wachsender Stichprobengröße, verdeutlicht durch die lineare Anpassung (—) (ohne den Wert bei $N = 1406$), zu erkennen.

dem Quadratgitter und dem Dreieckgitter verhalten sich Dipole isotrop. Dieses entspricht der Erwartung. Darüber hinaus zeigt der Dipol auf Gittern höherer Symmetrie ebenfalls isotropes Verhalten. Mit Zunahme der Probengröße zeigt sich nicht nur die Abnahme der Energiefluktuationen als Funktion des Winkels, die Fluktuationen ΔE sind selbst für eine kleine Probe mit 219 Punkten um einen Faktor 100 kleiner als die Anisotropie des Dipols auf dem Rechteckgitter mit dem Seitenverhältnis 1/2. Verhält sich der Dipol isotrop auf dem Quadratgitter, so zeigt der Quadrupol eine vierzählige Anisotropie [41], ist jedoch auf Gittern höherer Symmetrie isotrop. Auf der Diagonalen der Tabelle 6.1 ist die Funktion zur Beschreibung der Anisotropie besonders einfach. Für Multipole der Ordnung l auf einem Gitter mit $s = l$ äquivalenten Spiegelachsen ist der einzige nicht verschwindende Entwicklungskoeffizient c_l . Weiterhin treten im Rechteckgitter ($s = 1$) alle Entwicklungskoeffizienten c_k bis zur Ordnung $l = k$ auf, wobei l die Ordnung des Multipoles ist. Diese speziellen Fälle lassen sich zu folgenden Aussagen verallgemeinern:

- Multipole der Ordnung l können höchstens zu Anisotropiebeiträgen der Ordnung

$k = l$ führen.

- Es sind nur diejenigen Entwicklungskoeffizienten c_k von Null verschieden, für die gilt, daß k ein Vielfaches der Gittersymmetrie s ist (also $s|k$).

Diese Aussagen sind gleichbedeutend mit der Tatsache, daß für $s > k$ isotropes Verhalten vorliegt; dies entspricht dem rechten oberen Dreieck der Tabelle 6.1.

In einem Gitter aus polarisierten Körpern läßt sich somit aus reinen Symmetrieüberlegungen das qualitative Verhalten vorhersagen. Aus der Symmetrie der Körper können die von Null verschiedenen Multipolmomente abgeleitet werden. Sind diese Momente bekannt, so können mittels der Symmetrie der Gitteranordnung die zur Anisotropie beitragenden Terme angegeben werden.

Für Bravais-Gitter sollte es möglich sein, die Anisotropie unendlich vieler, wechselwirkender Teilchen analytisch anzugeben. Für Multipolmomente hoher Ordnung sind dazu jedoch komplizierte Doppelsummen zu lösen. Mittels Ewald-Summation konnten bereits Lösungen bis zum Quadrupolmoment angegeben werden [99, 100].

Tabelle 6.1: Die Anisotropie axialer Multipole Q_{l0} der Ordnung $l = 1$ bis $l = 5$ auf Gittern mit $s = 1$ (Rechteckgitter mit dem Seitenverhältnis 2 zu 1) bis $s = 5$ (Penrose-Gitter) äquivalenten Spiegelachsen. Die Tabelleneinträge beinhalten die Entwicklungsfunktionen gemäß Gl. 6.1 sowie die als Polardiagramm aufgetragenen Energieflächen $E(\varphi) - E_{\min}$. Die Energieflächen, welche für nichtperiodische Gitter berechnet wurden, sind *rot* eingefärbt, da die Ergebnisse im Grenzwert großer Stichproben (siehe Text) gültig sind.

| |  $s = 1$ |  $s = 2$ |  $s = 3$ |  $s = 4$ |  $s = 5$ |
|----------|---|--|--|--|--|
| Q_{10} |  $c_1 \sin^2 \varphi$ |  |  |  |  |
| Q_{20} |  $c_1 \sin^2 \varphi + c_2 \sin^2 2\varphi$ |  $c_2 \sin^2 2\varphi$ |  |  |  |
| Q_{30} |  $\sum_{k=1}^{k=3} c_k \sin^2 k\varphi$ |  $c_2 \sin^2 2\varphi$ |  $c_3 \sin^2 3\varphi$ |  |  |
| Q_{40} |  $\sum_{k=1}^{k=4} c_k \sin^2 k\varphi$ |  $c_2 \sin^2 2\varphi + c_4 \sin^2 4\varphi$ |  $c_3 \sin^2 3\varphi$ |  $c_4 \sin^2 4\varphi$ |  |
| Q_{50} |  $\sum_{k=1}^{k=5} c_k \sin^2 k\varphi$ |  $c_2 \sin^2 2\varphi + c_4 \sin^2 4\varphi$ |  $c_3 \sin^2 3\varphi$ |  $c_4 \sin^2 4\varphi$ |  $c_5 \sin^2 5\varphi$ |

Kapitel 7

Anisotropiemessungen mittels MOKE

Eine Anisotropie, wie sie in Kapitel 6 beschrieben wurde, resultiert aus der Wechselwirkung des gesamten Teilchenensembles. Insbesondere für die Anisotropie magnetischer Teilchen, angeordnet auf quasiperiodischen Gittern, ist das Richtungsverhalten, welches die Gittersymmetrie widerspiegelt, nur zu beobachten, wenn über einen großen Probenausschnitt gemittelt wird. Nicht zuletzt deswegen bietet es sich an, eine lateral integrierende Meßmethode zu verwenden, die über Flächen, groß gegen die Einheitszelle des Gitters, mittelt. Eine Meßmethode, welche diesen Anforderungen genügt und die es erlaubt die Anisotropie zu bestimmen, ist die Ellipsometrie [101] unter Ausnutzung des magneto-optischen Kerr Effekts (MOKE) [102, 103]. Eine detaillierte „Elektronentheorie des magnetischen Kerr Effekts“ wurde von Voigt [104] gegeben. In modernen Theorien wird der Einfluß der Magnetisierung eines Festkörpers auf die Reflexionseigenschaften auf einen zusätzlichen Term im Dielektrizitätstensor

$$\overleftrightarrow{\epsilon}' = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & -iQ_z & -iQ_y \\ -iQ_z & 1 & iQ_x \\ iQ_y & -iQ_x & 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}[Q_i \vec{Q}_j] \quad (7.1)$$

zurückgeführt [105, 106]. Dabei ist \vec{Q} der sog. Voigt-Vektor, ein empirischer Parameter, der abhängig von der Wellenlänge für magnetische Materialien experimentell bestimmt wird. Die Dielektrizitätskonstante im Fall verschwindender Magnetisierung ist ϵ . Für optische Frequenzen (10^{14} Hz- 10^{15} Hz) kann der Einfluß des Permeabilitätstensors $\overleftrightarrow{\mu}$ vernachlässigt werden [107]. Für den Fall, daß die Materie für verschwindende Magnetisierung optisch isotrop ist, zeigt der Voigt-Vektor in Richtung der Magnetisierung \vec{M} und es kann $\vec{Q} = Q\vec{e}_M$ geschrieben werden, wobei \vec{e}_M der Einheitsvektor in Richtung von \vec{M} ist. Die Voigt-Konstante Q ist eine komplexe Zahl. Ist der Betrag der Konstanten klein, so muß von Gl. 7.1 nur der lineare Term berücksichtigt werden. Der magneto-optische Kerr Effekt kann grundsätzlich ausgenutzt werden, um die mittlere Richtung

und Stärke der Magnetisierung im Beobachtungsvolumen zu bestimmen. Legt man an die zu untersuchende Probe ein äußeres Magnetfeld an, so kann das Verhalten der Magnetisierung als Funktion des angelegten Feldes in Form einer Hysteresekurve aufgezeichnet werden. Die Form der Hysteresekurve kann quantitativen Aufschluß über die Anisotropie geben. Darüber hinaus ist es möglich, mittels des magneto-optischen Kerr Effektes den Suszeptibilitätstensor zu vermessen und zwar sowohl im Nullfeld als auch in von Null verschiedenen Feldern. Diese Messungen erlauben die Bestimmung der Anisotropiefläche, die in Kap. 6 diskutiert werden.

7.1 Reflexionseigenschaften magnetischer Oberflächen

Wird Licht an der Oberfläche eines Festkörpers reflektiert, der einen Halbraum einnimmt, so läßt sich die Reflexion durch die Fresnel-Gleichungen [42], die sich aus den Stetigkeitsbedingungen der Maxwell-Gleichungen an Grenzflächen herleiten lassen, beschreiben. Das einfallende Licht kann in lineare, senkrecht zueinander stehende Polarisationsrichtungen zerlegt werden. Die Richtung der Polarisation ist durch den elektrischen Feldvektor der elektromagnetischen Welle vorgegeben. Das Licht ist p -polarisiert, wenn der Feldvektor in der Einfallsebene liegt, die durch den einfallenden und ausfallenden Strahl aufgespannt wird. Steht er senkrecht auf dieser Ebene spricht man von s -polarisiertem Licht¹. Es ist $\vec{E} = (E_s, E_p)$, und der Feldvektor nach der Reflexion \vec{E}' berechnet sich aus dem Vektor vor der Reflexion \vec{E} mittels der Reflexionsmatrix

$$\begin{pmatrix} E'_s \\ E'_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{ss} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{pp} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_s \\ E_p \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

Diese Gleichung definiert die Reflexionskoeffizienten r_{ss} und r_{pp} . Für optisch isotrope Materialien sind die Nebendiagonalelemente (r_{sp} und r_{ps}) identisch Null. Ist das einfallende Licht vollständig s -polarisiert, so gilt dies auch für das reflektierte (analog für p -Polarisation). Die Reflexionskoeffizienten sind

$$\begin{aligned} r_{ss} &= \frac{n_i \cos \alpha_i - n_f \cos \alpha_f}{n_i \cos \alpha_i + n_f \cos \alpha_f} \\ r_{pp} &= \frac{n_f \cos \alpha_i - n_i \cos \alpha_f}{n_f \cos \alpha_i + n_i \cos \alpha_f}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Dabei ist n der komplexe Brechungsindex. Die Indizes i und f beziehen sich auf das Medium, in dem sich der einfallende Strahl² (wie auch der reflektierte), bzw. der ge-

¹In allen optisch isotropen Medien steht der elektrische Feldvektor immer senkrecht auf der Ausbreitungsrichtung der Welle.

²typischerweise Vakuum

brochene Strahl fortpflanzen. Der Winkel α_f im brechenden Medium ergibt sich nach dem Gesetz von Snellius [108].

Ist die reflektierende Oberfläche magnetisch, so ist das Medium i. A. optisch anisotrop und die Nebendiagonalelemente der Reflexionsmatrix sind von Null verschieden. Der allgemeinste Fall beliebig dicker Mehrfachschichten, die auch eine Magnetisierung in beliebiger Richtung aufweisen können, erfordert eine aufwendige mathematische Behandlung, die in Ref. [109] zu finden ist. Die Gleichungen, welche die Reflexion beschreiben, können in einigen Fällen vereinfacht werden. Dazu müssen die magnetischen Schichten dünner als die Eindringtiefe des Lichtes und das Substrat, auf dem die Schichten aufgebracht sind, deutlich dicker sein. Die Vereinfachung ist in Ref. [106] beschrieben. Es ist

$$\begin{aligned}
 r_{ps} &= -\frac{4\pi}{\lambda} \left(\cos \alpha_f d_m n_m^2 Q_z - n_f n_i \sin \alpha_i d_m Q_y \right) \\
 &\quad \times \frac{n_i \cos \alpha_i}{(n_i \cos \alpha_i + n_f \cos \alpha_f)(n_f \cos \alpha_i + n_i \cos \alpha_f)} \\
 r_{sp} &= -\frac{4\pi}{\lambda} \left(\cos \alpha_f d_m n_m^2 Q_z + n_f n_i \sin \alpha_i d_m Q_y \right) \\
 &\quad \times \frac{n_i \cos \alpha_i}{(n_i \cos \alpha_i + n_f \cos \alpha_f)(n_f \cos \alpha_i + n_i \cos \alpha_f)}. \tag{7.4}
 \end{aligned}$$

Die Größen mit Index m beziehen sich auf das magnetische Material der Dicke d_m und dem Voigt-Vektor \vec{Q} . Die Wellenlänge des Lichtes ist λ . Das Koordinatensystem, auf das sich die Indizes x , y und z des Voigt-Vektors beziehen, liegt derart, daß z parallel zur Flächennormale der Reflexionsebene und y in der Reflexions- und in der Einfallsebene liegt. Die Gln. 7.3 und 7.4 gelten nur, wenn die Magnetisierung in dem angegebenen Koordinatensystem innerhalb der y - z -Ebene liegt oder das Licht des einfallenden Strahls s -polarisiert ist. Der Fall dünner, magnetischer Schichten mit einer Magnetisierung innerhalb der x - y -Ebene wird in Ref. [110] als weiterer Spezialfall der Rechnungen aus Ref. [109] untersucht.

Strahlt man auf die magnetische Oberfläche linear polarisiertes Licht ein, so ist das reflektierte Licht elliptisch polarisiert. Der Polarisationszustand kann durch zwei Winkel, θ und ϵ , auf der Poincaré-Kugel [101] angegeben werden. Die Verkippung der großen Halbachse ist θ , der Arkustangens aus dem Halbachsenverhältnis ϵ . Diese beiden Winkel werden zu dem komplexen Kerr-Winkel $\Phi_K = \theta + i\epsilon$ zusammengefaßt, und es gilt darüber hinaus

$$\begin{aligned}
 \theta^s &= \Re\left(\frac{r_{ps}}{r_{ss}}\right) \\
 \epsilon^s &= \Im\left(\frac{r_{ps}}{r_{ss}}\right). \tag{7.5}
 \end{aligned}$$

Die Größe θ^s wird Kerr-Rotation, ϵ^s Kerr-Elliptizitätswinkel³ genannt. Der Index s weist darauf hin, daß das eingestrahelte Licht s -polarisiert war. Es ist ebenfalls möglich, p -polarisiertes Licht zu nutzen. Der Nenner r_{ss} in den Gln. 7.5 ist dann durch r_{pp} zu ersetzen. Der Reflexionskoeffizient r_{pp} magnetischer Oberflächen weicht um einen zusätzlichen Term von der Definition Gl. 7.3 ab [110]. Im folgenden wird ausschließlich eingestraheltes Licht mit s -Polarisation behandelt, weshalb der Index s ausgelassen wird.

7.2 Funktionsweise des statischen, photometrischen Ellipsometers

Zu Beginn einer Messung mit einem photometrischen Ellipsometers sollte die Probe optisch isotrop sein. Dieses kann erreicht werden, indem sie entmagnetisiert wird, z. B. durch ein oszillierendes Feld abnehmender Amplitude. In diesem Fall kann $\theta = \epsilon = 0$ rad angenommen werden. Der Analysator (und das $\lambda/4$ -Plättchen, sofern es sich im Strahlengang befindet) wird derart ausgerichtet, daß die Intensität an der Photodiode Null wird. Danach wird der Analysator um den Winkel ϑ (Analysatorwinkel) verdreht, wobei die Intensität I hinter dem Analysator, von der Photodiode gemessen, gemäß

$$I = I_0 \sin^2 \vartheta \quad (7.6)$$

zunimmt, wenn I_0 die eingestrahelte Intensität ist. Ändern sich die Reflexionseigenschaften der Oberfläche und ist $\theta \neq \epsilon \neq 0$ rad, so ändert sich die Intensität, welche von der Photodiode gemessen wird. Der Einfluß des Analysators und des $\lambda/4$ -Plättchens kann im Müller-Formalismus [101], in Form von 4×4 -Matrizen, behandelt werden. Rechnungen ergeben ohne $\lambda/4$ -Plättchen

$$\frac{I}{I_0} = \frac{2 - \cos(2(\theta + \epsilon - \vartheta)) - \cos(2(-\theta + \epsilon + \vartheta))}{4}, \quad (7.7)$$

während sich die Intensität mit $\lambda/4$ -Plättchen gemäß

$$\frac{I}{I_0} = \frac{1 - \cos 2\theta \cos 2\epsilon \cos 2\vartheta - 4 \cos \epsilon \cos \vartheta \sin \epsilon \sin \vartheta}{2} \quad (7.8)$$

berechnet. Gilt zusätzlich

$$\left. \begin{matrix} \theta \\ \epsilon \end{matrix} \right\} \ll \vartheta \ll 1, \quad (7.9)$$

³oder kurz Rotation und Elliptizität

so können die allgemeinen Intensitätsgleichungen Gln. 7.7 und 7.8 genähert und umgeformt werden zur linearisierten Intensitätsgleichung [106]

$$\left. \begin{array}{l} \theta \\ \epsilon \end{array} \right\} = \frac{\Delta I}{I_0} \cdot \frac{\vartheta}{4}. \quad (7.10)$$

θ wird bestimmt, wenn sich das $\lambda/4$ -Plättchen nicht im Strahlengang befindet. Moduliert man das von außen angelegte Feld H_0 um ΔH (also $H = H_0 \pm \Delta H$), so variiert θ (ϵ) um $\Delta\theta$ ($\Delta\epsilon$) und die Suszeptibilität χ kann gemessen werden [111]. Befindet sich das $\lambda/4$ -Plättchen nicht im Strahlengang, und ist θ die Rotation in Sättigung, so ergibt sich die Suszeptibilität gemäß

$$\chi = \left. \frac{M_S}{\theta} \frac{\Delta\theta}{2\Delta H} \right|_{H=H_0} = \frac{M_S}{\theta} \frac{\Delta I}{I_0 \Delta H} \cdot \frac{\vartheta}{2}. \quad (7.11)$$

Mit $\lambda/4$ -Plättchen gilt diese Gleichung analog, wobei θ durch ϵ zu ersetzen ist.

Messungen zum Kerr Effekt sind Ellipsometriemessungen [101]. Es wird Licht einer definierten Polarisation auf eine Oberfläche gestrahlt und die Polarisation des reflektierten Lichtes, bisweilen in Abhängigkeit äußerer Parameter (z. B. Magnetfeld), untersucht. Die vorgestellten Methoden lassen sich mit unterschiedlichen Ellipsometrieaufbauten realisieren, die gezeigten experimentellen Daten wurden dabei alle mit einem statischen, photometrischen Ellipsometer⁴ aufgezeichnet. Dieses zeichnet sich durch sehr große Signal-zu-Rausch-Verhältnisse aus. Eine Skizze des verwendeten Kerr-Experiments ist in Abb. 7.1 zu sehen. Das einfallende Laser-Licht ist i. A. s-polarisiert, obwohl auch Messungen mit p-polarisiertem Licht möglich sind. Nach der Reflexion mit dem Einfallswinkel α_i wird der Polarisationszustand des Lichtes mittels eines $\lambda/4$ -Plättchens (optional) und eines zweiten Polarisators (Analytator) bestimmt. Die Intensität des transmittierten Lichtes wird mittels einer Photodiode bestimmt. Der Aufbau ermöglicht sowohl Messungen an Luft als auch im Vakuum.

Sofern die Meßgrößen, die beiden Kerr-Winkel, mehrere Grad betragen bzw. variieren, können diese mittels Verdrehen von Analytator und $\lambda/4$ -Plättchen bestimmt werden. Messungen an dünnen, magnetischen Schichten zeigen jedoch oft Winkel $(\theta, \epsilon) \leq 1$ mrad. In diesem Fall bietet sich ein statisches Ellipsometer, wie in Abb. 7.1 dargestellt, an.

⁴Statisch, photometrisch bedeutet, daß die Meßgröße die Lichtintensität ist und daß während einer Messung die optischen Komponenten des Aufbaus unverändert bleiben [101].

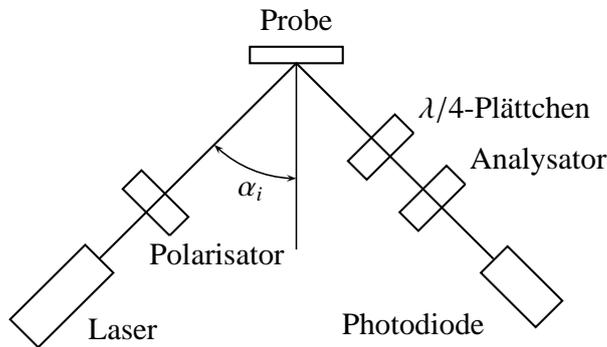


Abbildung 7.1: Skizze des verwendeten statischen Ellipsometers [112]. Die Feldspulen, welche ein Feld in der Probenebene erzeugen, sind nicht eingezeichnet.

7.3 Anisotropiebestimmung aus Hysteresekurven

Sind an der Wechselwirkung in einem System magnetischer Teilchen Multipolmomente unterschiedlicher Ordnung beteiligt, so zeigt sich dieses gemäß Kap. 6 in der magnetischen Anisotropie des Systems. Der magneto-optische Kerr Effekt erlaubt es unter gewissen Umständen die Anisotropiekonstanten aus Hysteresekurven zu bestimmen. Dieses gilt, wenn das zu untersuchende System eine uniaxiale magnetische Anisotropie besitzt. Es existiert genau eine ausgezeichnete Richtung, so daß die Selbstenergie des magnetischen Systems minimal wird, wenn die Magnetisierung parallel (oder antiparallel) zu dieser Achse, der sog. leichten Richtung, ausgerichtet ist. Weist die Energie als Funktion des Winkels der Magnetisierung neben dem globalen Minimum, der leichten Richtung, noch weitere lokale Minima in anderen Richtungen auf, so muß gewährleistet sein, daß die Lage in diesen lokalen Minima nicht stabil ist. Die Magnetisierung muß ohne äußeres Feld parallel zur leichten Richtung ausgerichtet sein⁵. Ist die leichte Richtung senkrecht zur Einfallsebene orientiert, ergibt sich für s -polarisiertes Licht ein Kerr-Winkel $\Phi_K = 0$ rad. Lenkt man die Magnetisierung durch ein äußeres Feld in der Probenebene und der Einfallsebene aus, so dreht die Magnetisierung um den Winkel φ aus der leichten Richtung. Als Folge ändert sich der Kerr-Winkel des reflektierten Lichtes und die gemessene Intensität. Das System wird die Energie

$$E(\varphi) = \underbrace{\sum_k c_k \sin^2 k\varphi}_{\text{Anisotropie}} - \underbrace{\mu_0 M_S H \sin \varphi}_{\text{Zeeman-Term}} \quad (7.12)$$

minimieren, so daß

$$\frac{\partial E(\varphi)}{\partial \varphi} = 0 \quad (7.13)$$

⁵Dieses kann, falls nötig, durch ein *Bias*-Feld erreicht werden.

zu setzen ist. Für die Steigung der Hystereseurve im Ursprung⁶ gilt im Grenzwert $\varphi \rightarrow 0$ und somit $\sin k\varphi \rightarrow k\varphi$ und $\cos k\varphi \rightarrow 1$ mit $d\varphi \propto d\theta$

$$\left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} = \frac{M_S}{\theta} \left. \frac{\partial \theta}{\partial H} \right|_{H=0} \approx \frac{\mu_0 M_S^2}{2 \sum_k c_k k^2}, \quad (7.14)$$

wenn θ die Kerr-Rotation bei paralleler Ausrichtung der Magnetisierung zum Feld ist.

Auf diese Weise kann nur die Summe der Anisotropiekoeffizienten bestimmt werden. Es ist damit nicht möglich, die Beiträge von Multipolmomenten unterschiedlicher Ordnungen aus einer Messung zu bestimmen. Die Koeffizienten einzelner Ordnungen können jedoch mittels der Theorie aus Kap. 6 berechnet werden. Es ist weiterhin bekannt, daß die Wechselwirkung der Momente der Ordnung l im Abstand r mit $r^{-(2l+1)}$ fällt. Folglich verhalten sich die Anisotropiebeiträge unterschiedlicher Ordnungen ebenso. Ist das zu untersuchende System eine Gitteranordnung streufeldgekoppelter Teilchen, so ermöglichen wiederholte Messungen mit variablem Gitterabstand die Trennung der Beiträge unterschiedlicher Ordnungen durch eine einfache polynomiale Anpassung.

7.4 Anisotropieberechnung aus winkelabhängiger Suszeptibilität

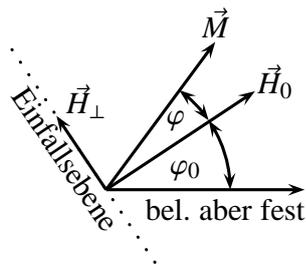


Abbildung 7.2: Feldgeometrie zum Suszeptibilitätsexperiment. Der Winkel φ_0 des Feldes \vec{H}_0 bezieht sich auf eine beliebige aber feste Richtung. Das Modulationsfeld \vec{H}_\perp steht senkrecht auf \vec{H}_0 und lenkt die Magnetisierung \vec{M} um φ aus.

Während die Messung von Hysteresekurven den Zugriff auf die Anisotropiekonstanten ermöglicht, wenn eine magnetisch schwere Richtung existiert, kann mittels der Suszeptibilität die Anisotropiefläche $E(\varphi_0)$ wechselwirkender, magnetischer Teilchen auf einem Gitter vermessen werden [113]. Der Azimutalwinkel φ_0 bezieht sich dabei auf eine beliebige aber feste Richtung der Probe (vgl. Abb. 7.2). Um die Suszeptibilität zu messen, wird ein Feld \vec{H}_0 in Richtung von φ_0 angelegt. Die Einfallsebene des Lichtes wird so gewählt, daß \vec{H}_0 senkrecht auf dieser steht. Sättigt das Feld die Magnetisierung, steht diese somit ebenfalls senkrecht auf der

⁶Es sei daran erinnert, daß ohne Feld kein Signal zu messen ist und die Hystereseurve folglich durch den Ursprung verläuft.

Einfallsebene, und es wird für s -polarisiertes Licht kein magnetisches Signal gemessen. Weicht die Lage der Magnetisierung von einer parallelen Ausrichtung um den Winkel φ ab, ist ein magneto-optisches Signal meßbar und die Energie des Systems ergibt sich zu

$$E_{\text{ges}} = E(\varphi + \varphi_0) - \mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H}, \quad (7.15)$$

wobei sie im Gleichgewicht minimal ist und

$$\frac{\partial E_{\text{ges}}}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi} (E(\varphi + \varphi_0) - \mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H}_0) = 0 \quad (7.16)$$

gilt. Legt man nun senkrecht zu \vec{H}_0 , also in der Einfallsebene, ein Modulationsfeld \vec{H}_\perp mit $\|\vec{H}_\perp\| \ll \|\vec{H}_0\|$ an, so wird die Magnetisierung leicht ausgelenkt. Für kleine Modulationsfrequenzen, mit Zeitskalen die länger als die Relaxationszeiten sind und die Magnetisierung somit quasistatisch folgen kann, ist die Gesamtenergie weiterhin minimal. Da die Winkeländerungen der Magnetisierung, hervorgerufen durch \vec{H}_\perp , nur klein sind und die Lage nur geringfügig von der parallelen Ausrichtung zu \vec{H}_0 abweicht, kann Gl. 7.16 umformuliert werden zu

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial \varphi} (E(\varphi + \varphi_0) - \mu_0 \vec{M} \cdot (\vec{H}_0 + \vec{H}_\perp)) \\ &= \frac{\partial}{\partial \varphi} (E(\varphi + \varphi_0) - \mu_0 \|\vec{M}\| \cdot (\|\vec{H}_0\| \cos \varphi + \|\vec{H}_\perp\| \sin \varphi)) \\ &= E'(\varphi + \varphi_0) + \mu_0 \|\vec{M}\| \cdot (\|\vec{H}_0\| \sin \varphi - \|\vec{H}_\perp\| \cos \varphi) \\ &\approx E'(\varphi + \varphi_0) + \mu_0 \|\vec{M}\| \cdot (\|\vec{H}_0\| \varphi - \|\vec{H}_\perp\|). \end{aligned} \quad (7.17)$$

Der Fall großer Winkel zwischen \vec{M} und \vec{H}_0 wird im nächsten Abschnitt behandelt. Das Modulationsfeld erzeugt eine geringe Magnetisierungskomponente M_\perp in der Einfallsebene, die sich mittels Lock-In-Technik [114] als Suszeptibilität χ_\perp detektieren läßt. Die Suszeptibilität ist mit $\|\vec{M}\| = M_S$ und $\|\vec{H}_\perp\|$ ersetzt durch Gl. 7.17, nach $\|\vec{H}_\perp\|$ aufgelöst

$$\begin{aligned} \chi_\perp &= \frac{\Delta M_\perp}{\Delta \|\vec{H}_\perp\|} \\ &= M_S \frac{\Delta \sin \varphi}{\Delta \|\vec{H}_\perp\|} \approx M_S \frac{\Delta \varphi}{\Delta \|\vec{H}_\perp\|} = M_S \frac{1}{\frac{\Delta \|\vec{H}_\perp\|}{\Delta \varphi}} \\ &= M_S \frac{1}{\frac{1}{\Delta \varphi} \Delta \|\vec{H}_\perp\|} = M_S \frac{1}{\frac{1}{\Delta \varphi} \Delta (\|\vec{H}_0\| \varphi + \frac{E'(\varphi + \varphi_0)}{\mu_0 M_S})} \\ &\approx M_S \frac{1}{\|\vec{H}_0\| + \frac{E''(\varphi_0)}{\mu_0 M_S}} = \chi_\perp(\varphi_0). \end{aligned} \quad (7.18)$$

Die zweite Ableitung der Anisotropieenergie kann folglich aus der Suszeptibilität berechnet werden

$$E''(\varphi_0) = \mu_0 M_S^2 \left(\frac{1}{\chi_{\perp}(\varphi_0)} - \frac{\|\vec{H}_0\|}{M_S} \right). \quad (7.19)$$

Die Anisotropieenergiefläche ergibt sich aus der zweifachen Integration über Gl. 7.19. Der lineare Term ($\propto \varphi_0$) der Integration muß wegen der Anschlußbedingung $E(\varphi_0) = E(\varphi_0 + 2\pi)$ verschwinden. Der konstante Term kann Null gesetzt werden, da dieser keine Winkelabhängigkeit besitzt und somit keine Anisotropiebeiträge liefert. An die Anisotropieenergiefläche lassen sich die trigonometrischen Funktionen gemäß Gl. 6.1 anpassen und somit die Entwicklungskoeffizienten bestimmen. Wieder ist es auf diese Weise nicht möglich, die Beiträge unterschiedlicher Multipolordnungen zu trennen. Es muß analog zu Abschnitt 7.3 vorgegangen und die Gitterabstände zwischen den magnetischen Teilchen variiert werden.

7.4.1 Iterationsverfahren zur Anisotropieberechnung für große Anisotropieenergien

Für den Fall einer beliebigen und zunächst unbekanntem Anisotropieenergiefläche kann nicht davon ausgegangen werden, daß in einem beliebigen Winkel φ_0 die Magnetisierung parallel zu \vec{H}_0 liegt. Abweichungen werden für große Felder \vec{H}_0 nur kleine Korrekturen beitragen. Sollten die Abweichungen jedoch groß sein, so können die notwendigen Korrekturen zu Gl. 7.19 selbstkonsistent vorgenommen werden.

In nullter Näherung wird eine parallele Ausrichtung angenommen und die Anisotropieenergiefläche berechnet. Ist diese bekannt, so läßt sich die Lage der Magnetisierung in erster Näherung mittels einer Energieminimierung nach Gl. 7.16 berechnen. Der Winkel zwischen der Lage der Magnetisierung und der parallelen Ausrichtung zu \vec{H}_0 sei $\Delta\varphi_0$. Dabei ist $\Delta\varphi_0$ eine Funktion von φ_0 (s. Abb. 7.3 (c)). Diese Rechnung ist in jedem Fall erforderlich, um die Annahme einer parallelen Ausrichtung von \vec{M} und \vec{H}_0 zu bestätigen oder zu widerlegen. Im Fall großer Abweichungen wurde die Energiefläche folglich nicht für φ_0 sondern für $\varphi_0 + \Delta\varphi_0$ berechnet. Transformiert man den Datensatz $(\varphi_0, E''(\varphi_0))$ zu $(\varphi_0 + \Delta\varphi_0, E''(\varphi_0))$, kann die Anisotropieenergiefläche neu berechnet werden. Das Ergebnis ist eine Anisotropiefläche, die weniger von der tatsächlichen abweicht. Dieser Vorgang muß wiederholt werden, bis die Korrekturen vernachlässigbar sind. Das Verfahren wird in Abb. 7.3 demonstriert. Das senkrecht angelegte Feld beträgt in der Simulation $\|\vec{H}_0\| = 100$ mT. Die Anisotropiefläche ist als $E(\varphi_0) = 10^4(\sin^2 \varphi_0 + 0.8 \sin^2 2\varphi_0)$ J/m³ angenommen. Die Form der Anisotropiefläche, die in Abb. 7.3 (a) zu sehen ist, wurde dabei willkürlich gewählt. Der Vorfaktor von 10^4 J/m³ ist in der Dipolwechselwirkung zweier Kreisscheiben aus Kobalt

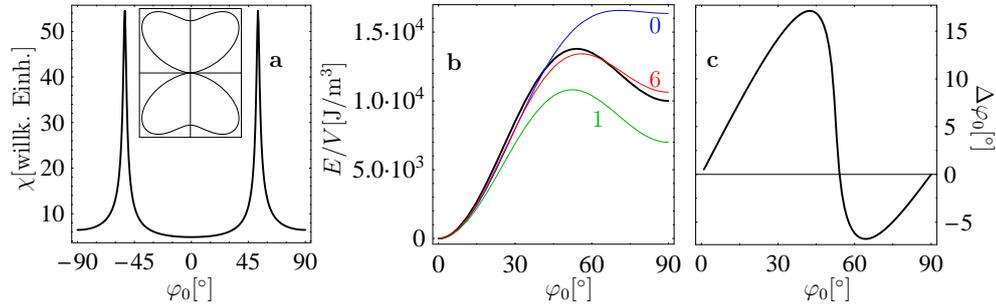


Abbildung 7.3: Simulation des Suszeptibilitätsexperiments mit einer Anisotropie $E(\varphi_0) = 10^4(\sin^2 \varphi_0 + 0.8 \sin^2 2\varphi_0) \text{ J/m}^3$. Die simulierte Suszeptibilität als Funktion des Winkels ist in (a) dargestellt. Die Anisotropieenergiefläche ist als Polarplot klein eingefügt. Für die Rechnung wurde ein Feld von $\|\vec{H}_0\| = 100 \text{ mT}$, einem Modulationsfeld $\|\vec{H}_\perp\| = 20 \text{ } \mu\text{T}$ und $\mu_0\|\vec{M}\| = 1.72 \text{ T}$ angenommen. Die gemäß Gl. 7.19 berechnete Anisotropie (—) und nach einem Iterationsschritt (—). Bereits nach sechs Schritten (—) stimmt das Ergebnis mit $E(\varphi_0) \approx 10^4(1.1 \cdot \sin^2 \varphi + 0.7 \sin^2 2\varphi) \text{ J/m}^3$ gut mit dem wahren Verlauf (—) überein (b), obwohl der Winkel $\Delta\varphi_0$ zwischen \vec{M} und \vec{H}_0 , in (c) als Funktion von φ_0 berechnet, bis zu 17° beträgt.

mit einer Höhe und einem Radius von 5 nm in einem Abstand von 30 nm begründet. Um die Anisotropie zu bestimmen, muß die Wechselwirkungsenergie durch ein Bezugsvolumen dividiert werden. Dieses Volumen wurde als Produkt aus quadratischem Scheibenabstand und Höhe der Struktur gewählt. Damit ergibt sich eine Energiedichte von der Größenordnung 10^4 J/m^3 . Die aus der simulierten Suszeptibilität Abb. 7.3 (a) berechnete Anisotropie in Abb. 7.3 (b) weicht deutlich vom wahren Verlauf ab. Es sind mehrere Iterationsschritte erforderlich, um den ursprünglichen Verlauf zu reproduzieren. Nach sechs Iterationen ist mit $E(\varphi_0) \approx 10^4(1.1 \sin^2 \varphi + 0.7 \sin^2 2\varphi) \text{ J/m}^3$ bereits eine gute Übereinstimmung festzustellen. Es ist jedoch nicht zu erwarten, daß diese Methode in diesem extremen Beispiel genauere Ergebnisse erzielen wird, da die Winkel zwischen angelegtem Feld und Magnetisierung bis zu 17° betragen (Abb. 7.3 (c)). Die Voraussetzung ($\vec{M} \parallel \vec{H}_0$) für die Verwendung der Methode ist somit nicht mehr gegeben. Für sehr große Abweichungen müssen Korrekturen der Bestimmungsgleichung für die Energiefläche vorgenommen werden, welche die zunächst unbekannte erste Ableitung der Anisotropieenergiefläche beinhalten. Die Iterationsschritte werden dadurch deutlich aufwendiger. Dennoch zeigen die Ergebnisse in Abb. 7.3, daß mittels der Iteration aus Gl. 7.19 selbst bei Winkelfehlern von fast 20° akzeptable Ergebnisse erzielt werden können, obwohl bei der zugrundeliegenden Rechnung die Anisotropieenergie mehr als 10% der Zeeman-Energie beträgt.

7.5 Berechnung der z -Komponente der Magnetisierung

Die Berechnung der Anisotropie und somit der Wechselwirkungsbeiträge verschiedener Multipolordnungen ist mit den Methoden aus den vorigen beiden Kapiteln möglich. Beide setzen aber voraus, daß die wesentlichen magnetischen Eigenschaften der Probe bekannt sind. Insbesondere muß gewährleistet sein, daß die Magnetisierung der Probe durch die angelegten Felder gesättigt werden kann. Dieses vereinfacht zum einen die Rechnungen aus Kap. 7.4, zum anderen ist es erforderlich, um die Meßwerte in SI-Einheiten umzurechnen. Ein Problem bei der Bestimmung der Sättigung tritt auf, wenn ein Anisotropiebeitrag parallel zu Probennormalen wirkt und die Magnetisierung einen Winkel zwischen 0° und 90° zur Reflexionsebene einnimmt. In diesem Fall ist es notwendig den Winkel aus Hysteresekurven zu berechnen [115, 116]. Die Messungen und Rechnungen, die notwendig sind, um die Einflüsse der y - und der z -Komponente der Magnetisierung zu trennen, werden in diesem Abschnitt behandelt.

Weist die Magnetisierung einer Probe als Folge eines senkrechten Anisotropiebeitrages eine z -Komponente der Magnetisierung auf, so wird die maximale Rotation (Elliptizität) des reflektierten Lichtes davon beeinflusst. Da die senkrechte Magnetisierung gemäß den Gln. 7.4 mit dem Kosinus des Einfallswinkels eingeht, die Komponente in der Ebene jedoch mit dem Sinus, hängt das gemessene Signal vom Vorzeichen des Einfallswinkels ab; die Rotation bei positivem Einfallswinkel $\theta_+(\alpha_+)$ unterscheidet sich von derjenigen bei negativem Winkel $\theta_-(\alpha_-)$. Diese Abhängigkeit kann ausgenutzt werden, um die Beiträge der z -Komponente zu trennen [115]. Das Magnetfeld wird fest in Meßrichtung (y -Richtung) angelegt. Die extremalen Feldwerte sind derart zu wählen, daß die Magnetisierung in der y - z -Ebene liegt; die x -Komponente verschwindet. Für eine zweite Messung wird der Laser mit dem Detektor aus Abb. 7.1 vertauscht. Damit wird das Vorzeichen des Einfallswinkels geändert. Die Trennung des symmetrischen Anteils (Index S) einer Hysteresekurve, die Folge der oben erwähnten Kosinusabhängigkeit und des antisymmetrischen Anteils (Index A) aus der Sinusabhängigkeit, erfolgt aus den zwei Messungen der Rotation (Elliptizität) mit positiven und negativen Einfallswinkel nach

$$\begin{aligned}\theta_S &= \frac{\theta_+ + \theta_-}{2} \\ \theta_A &= \frac{\theta_+ - \theta_-}{2}\end{aligned}\tag{7.20}$$

und analog kann auch die Elliptizität bestimmt werden. Diese Hysteresekurven können mit den Gleichungen aus Ref. [106] ausgewertet werden. Die Genauigkeit dieses Verfahrens hängt im wesentlichen von der Genauigkeit des empirischen Voigt-Vektors ab. Um die Genauigkeit für dünne magnetische Schichten zu erhöhen, bietet es sich an, den

Quotienten q auszuwerten, der für die Elliptizität als

$$q_\epsilon := \frac{\epsilon_+}{\epsilon_-} = \frac{\Im(r_{ps}^+/r_{ss}^+)}{\Im(r_{ps}^-/r_{ss}^-)} \quad (7.21)$$

definiert ist. Für θ wird der Realteil verwendet. Der Quotient kann nicht gekürzt werden und erfordert eine aufwendige Berechnung. Das Ergebnis ist [116]

$$q_\epsilon = \frac{\omega/\kappa (A \frac{M_z}{M_y} - 1) + C \frac{M_z}{M_y} + D}{\omega/\kappa (A \frac{M_z}{M_y} + 1) + C \frac{M_z}{M_y} - D}. \quad (7.22)$$

Der komplexe Wert des Voigt-Vektors ist $\kappa + i\omega$, so daß $\vec{Q} = (\kappa + i\omega)\vec{e}_M$ gilt, wenn \vec{e}_M der Einheitsvektor in Richtung der Magnetisierung ist. A, C, D sind Materialkonstanten, definiert als

$$A := \frac{a}{b}, \quad C := \frac{c}{b}, \quad D := \frac{d}{b}. \quad (7.23)$$

Die Größen a, b, c und d berechnen sich aus den optischen Konstanten zu

$$\begin{aligned} a &= \cos \alpha_f (\cos \alpha_f)^* \left(\cos \alpha_i \Re[(1 - (n_f^*)^2)n_m^2] - \Re[n_f(n_m^*)^2 \cos \alpha_f] \right) \\ &\quad + \cos^2 \alpha_i \Re[n_f^* n_m^2 \cos \alpha_f] \end{aligned} \quad (7.24)$$

$$\begin{aligned} b &= \sin \alpha_i \left(\cos \alpha_i \Re[(1 - (n_f^*)^2)n_f(\cos \alpha_f)^*] \right. \\ &\quad \left. + n_f n_f^* (\cos^2 \alpha_i - \Re[\cos^2 \alpha_f]) \right) \end{aligned} \quad (7.25)$$

$$\begin{aligned} c &= \cos \alpha_f (\cos \alpha_f)^* \left(\cos \alpha_i \Im[(1 - (n_f^*)^2)n_m^2] + \Im[n_f(n_m^*)^2 \cos \alpha_f] \right) \\ &\quad + \cos^2 \alpha_i \Im[n_f^* n_m^2 \cos \alpha_f] \end{aligned} \quad (7.26)$$

$$\begin{aligned} d &= -\sin \alpha_i \left(\cos \alpha_i \Re[(1 - (n_f^*)^2)n_f(\cos \alpha_f)^*] \right. \\ &\quad \left. + n_f n_f^* \Im[\cos^2 \alpha_f] \right) \end{aligned} \quad (7.27)$$

Der komplexe Einfallswinkel im Substrat α_f ergibt sich wieder aus dem Gesetz von Snellius, und es ist

$$\cos \alpha_f =: \gamma + i\delta \quad (7.28)$$

mit

$$\gamma = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\sqrt{\left(1 - \sin^2 \alpha_i \frac{\Re[n_f^2]}{(n_f n_f^*)^2}\right)^2 + \left(\sin^2 \alpha_i \frac{\Im[n_f^2]}{(n_f n_f^*)^2}\right)^2} + \left(1 - \sin^2 \alpha_i \frac{\Re[n_f^2]}{(n_f n_f^*)^2}\right)^2 \right)} \quad (7.29)$$

$$\delta = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\sqrt{\left(1 - \sin^2 \alpha_i \frac{\Re[n_f^2]}{(n_f n_f^*)^2}\right)^2 + \left(\sin^2 \alpha_i \frac{\Im[n_f^2]}{(n_f n_f^*)^2}\right)^2} - \left(1 - \sin^2 \alpha_i \frac{\Re[n_f^2]}{(n_f n_f^*)^2}\right)^2 \right)}. \quad (7.30)$$

Der Quotient M_z/M_y in Gl. 7.22 kann durch den Winkel der Magnetisierung θ_z zur Oberfläche ersetzt werden. Mit $M_z/M_y = \tan \theta_z$ kann nach dem Winkel aufgelöst werden zu

$$\theta_z = \arctan \left(\frac{\omega/\kappa - D}{A\omega/\kappa + C} \cdot \frac{1 + q_\epsilon}{1 - q_\epsilon} \right). \quad (7.31)$$

Gilt außerdem $|\omega/\kappa| \ll |C/A|$ und $|\omega/\kappa| \ll |D|$, so ist θ_z näherungsweise

$$\theta_z \approx \arctan \left(\frac{D}{C} \cdot \frac{q_\epsilon + 1}{q_\epsilon - 1} \right) = \arctan \left(\frac{d}{c} \cdot \frac{q_\epsilon + 1}{q_\epsilon - 1} \right). \quad (7.32)$$

In diese Approximation geht der Voigt-Vektor nicht ein. Sie ist exakt für $\theta_z = 0^\circ$ und $\theta_z = 90^\circ$. Für andere Winkel führt die Näherung zu Fehlern, deren Größe vom Materialsystem abhängt. Für Kobalt auf Kupfer beträgt der maximale Fehler $\Delta\theta_z = 3^\circ$, für $\theta_z = 43.5^\circ$. Mit dieser Methode kann somit eine präzise Vektoranalyse der Magnetisierung vorgenommen werden (sofern die Bedingung $\theta, \epsilon \ll \vartheta \ll 1$ erfüllt ist). Die Gleichungen, die für den Quotienten q_ϵ hergeleitet wurden, lassen sich ebenfalls für q_θ berechnen. Das Ergebnis hat die gleiche mathematische Struktur mit anderen Koeffizienten A, B und D . Mit dieser Information ist die Messung der Anisotropie und somit die Bestimmung der Multipolmomente möglich.

Es ist jedoch problematisch, wenn $\theta, \epsilon \ll \vartheta \ll 1$ als Voraussetzung zur Linearisierung der allgemeinen Intensitätsgleichungen (Gln. 7.7 und 7.8) nicht mehr gegeben ist. Die vielfältigen Besonderheiten, die unter diesen Bedingungen auftreten, werden im folgenden Abschnitt diskutiert.

7.6 Besonderheiten des statischen Ellipsometers an Beispielen

In den meisten Fällen ist die linearisierte Intensitätsgleichung (Gl. 7.10) eine gute Näherung bei der Berechnung magneto-optischer Signale. Die Näherung versagt je-

doch, wenn die Bedingung $\theta, \epsilon \ll \vartheta \ll 1$ (Gl. 7.9) nicht mehr erfüllt ist. Dieses kann aus verschiedenen Gründen der Fall sein. Zum einen kann der Analysatorwinkel ϑ bewußt klein gewählt werden, um das Signal-zu-Rausch-Verhältnis zu verbessern. Das magneto-optische Signal ist in der linearisierten Intensitätsgleichung (Gl. 7.10) proportional zu ϑ , während die Gesamtintensität und somit auch das Rauschen, mit $I = I_0 \sin^2 \vartheta$ (Gl. 7.6) annähernd proportional zum Quadrat von ϑ ist. Das Signal-Rausch-Verhältnis fällt daher mit $1/\vartheta$. Zum anderen ist es möglich, daß eine der beiden Meßgrößen, Elliptizität oder Rotation, bedeutend größer als die jeweils andere ist. Wird die kleinere der beiden gemessen, wird sich der Einfluß der zweiten als Folge der nicht-linearen, allgemeinen Intensitätsgleichungen (Gl. 7.7 und Gl. 7.8) bemerkbar machen. Leider lassen sich diese beiden Gleichungen i. A. nicht invertieren, womit die Linearisierung der Intensitätsgleichungen zur Auswertung praktisch notwendig ist. Es stellen sich somit zwei Fragen. Kann man an der Form einer Hysteresekurve erkennen, daß die Bedingung zur linearen Auswertung nicht mehr gegeben ist, und was ist in diesem Fall zu tun?

Die Verwendung der linearen Gleichung außerhalb ihres Gültigkeitsbereiches führt durch den Prozeß der Auswertung zu einer Verzerrung der Meßsignale. In diesem Abschnitt werden zunächst die möglichen Ursachen für Nichtlinearitäten getrennt voneinander und dann in ihrer Überlagerung untersucht. Die Nichtlinearitäten werden für vier unterschiedliche Meßaufbauten berechnet und mit simulierten und realen Messungen verglichen. Im Anschluß wird gezeigt, daß diese vier unabhängigen Messungen dazu dienen können, die Verzerrungen iterativ zu korrigieren. Zu diesem Zweck wird ein Algorithmus vorgeschlagen, dessen Funktionsweise an einer Fe/Si-Probe demonstriert wird und der es mit vier unabhängigen Messungen ermöglicht, auch stark verzerrte Hysteresekurven auszuwerten.

7.6.1 Kerr-Messungen bei gleicher Größenordnung von Elliptizität und Analysatorwinkel ($\epsilon \lesssim \vartheta$ und $\theta \equiv 0$)

Für den Fall, daß die Elliptizität von gleicher Größenordnung (aber kleiner) als der Analysatorwinkel ϑ ist, ist eine Linearisierung der Intensitätsgleichungen nicht zulässig. Für große Kerr-Winkel kann die Sinusfunktion aus Gl. 7.6 als lineare Verstärkerkurve angesehen werden. Für große Winkel macht sich jedoch der parabolische Charakter der Intensität als Funktion des Analysatorwinkels bemerkbar. Die gleiche Problematik gilt analog für die Rotation ($\theta \lesssim \vartheta$ und $\epsilon \equiv 0$). Wird die Hysteresekurve dennoch mit Gl. 7.10 ausgewertet, so erscheint die Hysteresekurve verzerrt. Kleinere Intensitäten werden unterdrückt, während größere hervorgehoben werden. Die resultierende Verzerrung ist, außer bei rechteckigen Hysteresekurven, immer zu beobachten. Abb. 7.4

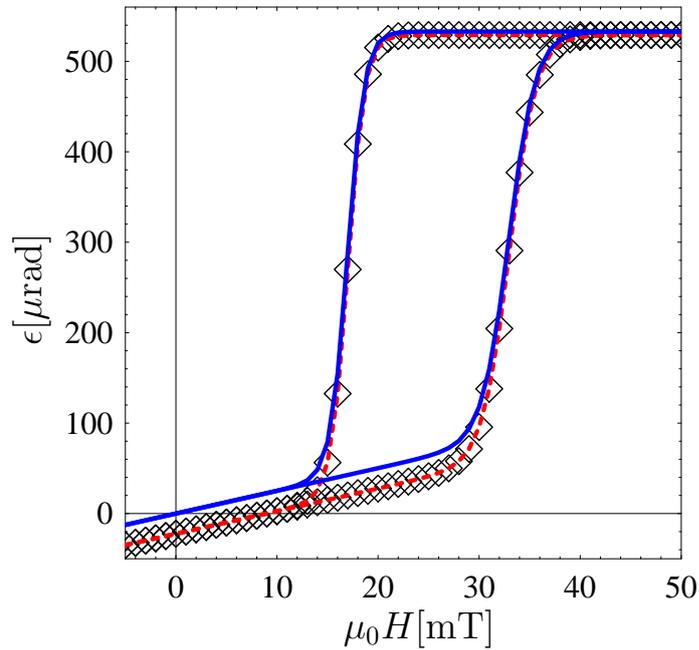


Abbildung 7.4: Der erste Quadrant experimenteller Daten (\diamond) einer Hysteresekurve, welche mit dem Aufbau aus Abb. 7.1 (mit $\lambda/4$ -Plättchen) aufgenommen wurde. Die Probe ist eine 24 ML dicke Kobaltschicht auf einem Kupfer (1 1 13) Einkristall. Die Kurve in magnetisch schwerer Richtung zeigt eine feldgetriebene Spinreorientierung [117]. Die ungestörte Kurve ist als — gezeigt, durch den Ursprung verlaufend, wie es von der Theorie für die Hysteresekurve in schwerer Richtung erwartet wird. Von dieser Kurve ausgehend lassen sich die Nichtlinearitäten der Optik simulieren. Das Ergebnis ist eine zweite Kurve (---), die gut mit dem Experiment übereinstimmt.

zeigt ein Beispiel. Es handelt sich um eine Messung an 24 Monolagen (ML) Kobalt auf einem Kupfer (1 1 13) Einkristall, die mit der linearisierten Gleichung (Gl. 7.10) ausgewertet wurde. Die Elliptizität dieser Messung beträgt etwa $\epsilon \approx 530 \mu\text{rad}$ und damit etwa 10% des Analysatorwinkels von $\vartheta = 6.28 \text{ mrad}$. Eine Verzerrung der Kurve ist zu beobachten; obwohl es sich um eine magnetisch schwere Richtung handelt, verläuft die Kurve nicht durch den Koordinatenursprung, der durch die Theorie definiert ist als $H = 0 \text{ mT}$ und $(\epsilon_{\max} + \epsilon_{\min}) \equiv 0 \text{ rad}$.

7.6.2 Der Einfluß einer großen Rotation auf die Messung der Elliptizität ($\epsilon \ll \vartheta$ und $\theta \lesssim \vartheta$)

Wenn die Elliptizität gemessen werden soll, wobei die Rotation nur geringfügig kleiner als der Analysatorwinkel ist, so zeigt die Hysteresekurve nach der Auswertung mit der linearisierten Gl. 7.10 Verzerrungen, die auf eine Mischung von Elliptizität und Rotation zurückzuführen sind. Die Elliptizität in Sättigung wird unterschätzt. In Abb. 7.5 zeigt eine Simulation, bei der optische Elemente des Meßaufbaus im Müller-Formalismus [101] beschrieben werden, einen Überschwinger nahe der Koerzitivfeldstärke. Für diese Feldwerte übersteigt die Elliptizität vom Betrage her denjenigen Wert, der in Sättigung angenommen wird. Je geringer der Unterschied zwischen Kerr-Rotation und Analysatorwinkel desto größer ist der Überschwinger. Die Verzerrung wie auch der Überschwinger treten unabhängig vom Vorzeichen von Elliptizität und Rotation.

Bemerkenswert ist, daß die Verzerrung in Abb. 7.5 leicht mit einer Verschiebung der Hysteresekurve bezüglich der Abszisse verwechselt werden kann, die dann möglicherweise als Einfluß eines *Bias*-Feldes mißinterpretiert wird. Auch für $\epsilon \ll \theta \ll \vartheta$ wird eine Verzerrung, äquivalent zu derjenigen aus Kap. 7.6.1, gefunden.

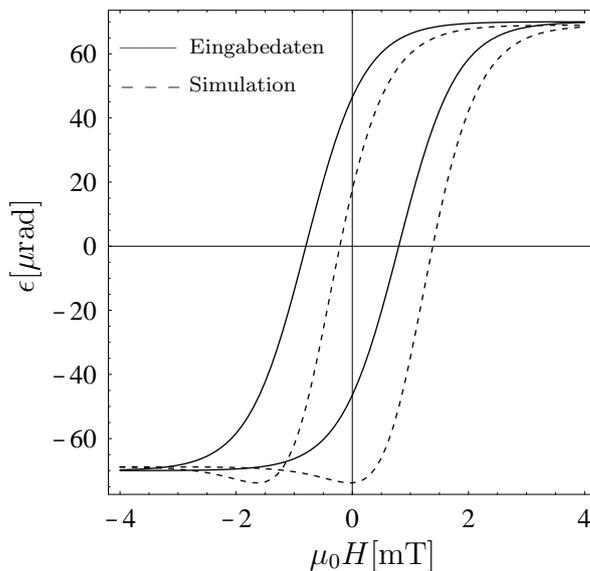


Abbildung 7.5: Simulation der Kerr-Elliptizität. Die Elliptizität (—) als Funktion des angelegten Feldes und die Rotation (nicht dargestellt) besitzen die gleiche Symmetrie; die letztere ist aber deutlich größer (800 μrad) und von entgegengesetztem Vorzeichen. Die Simulation der Messung und die anschließende Auswertung der simulierten Daten mit Gl. 7.10 zeigt die Nichtlinearitäten (- -) auf.

7.6.3 Allgemeine Überlegungen zu Verzerrungen von Hysteresekurven

Bei Untersuchungen von neuen Materialien oder Materialkombinationen mit unbekanntem magnetischen Eigenschaften ist die Elliptizität und Rotation in Sättigung zunächst unbekannt, was zu Problemen führen kann, wenn sich die Größenordnung dieser beiden stark unterscheiden. Darüber hinaus kann es vorkommen, daß das magneto-optische Signal Beiträge beinhaltet, die ihren Ursprung in einer senkrechten Komponente der Magnetisierung haben (vgl. Kap. 7.5). Die Folgen dieser senkrechten Ma-

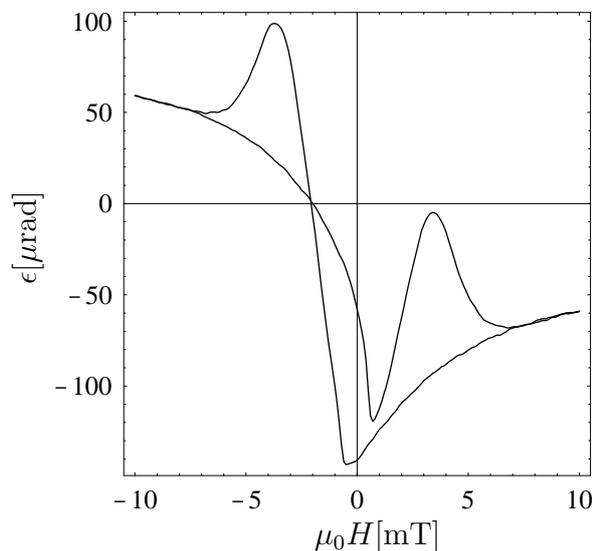


Abbildung 7.6: Kerr-Elliptizität einer 76 nm dicken Eisenschicht auf Silizium (001). Die Schicht wurde mit 60 keV Argonionen mit einer Dichte von $10^{16} \frac{\text{Ar}^+}{\text{cm}^2}$ beschossen [118].

gnetisierungskomponente werden später diskutiert. Eine Messung, bei der alle bisher genannten Effekte auftreten, ist in Abb. 7.6 zu sehen. Bei der Probe handelt es sich um eine 76 nm dicke Eisenschicht die mittels Elektronenstrahlverdampfen auf einen Si(001)-Wafer aufgebracht wurde. Während ein äußeres Magnetfeld in der Ebene angelegt wurde, ist die Oberfläche mit 60 keV Argonionen beschossen worden. Die Bestrahlungsdichte betrug ca. $10^{16} \frac{\text{Ar}^+}{\text{cm}^2}$. Die Hysteresekurve in Abb. 7.6 erscheint irregulär. Auf den ersten Blick scheint diese Messung keine sinnvolle Auskunft über das magnetische Verhalten der Probe zuzulassen.

Wie im Folgenden gezeigt wird, kann das Verhalten der Probe mit wenigen Annahmen erklärt werden. Um die genauen Vorgänge aufzuzeigen sind jedoch weitere Messungen erforderlich.

7.6.4 Interpretation der Messung an Fe/Si(001)

Um das magnetische Verhalten der Probe aus Abb. 7.6 verstehen zu können, ist es erforderlich den symmetrischen und den antisymmetrischen Teil der Hystereseurve zu trennen. Zu diesem Zweck werden Laser und Detektor in einer weiteren Messung vertauscht. Wenn die Bedingung $\theta, \epsilon \ll \vartheta \ll 1$ erfüllt ist, erlaubt diese Methode direkt die Beiträge einer z -Komponente der Magnetisierung zu erfassen [115], sowohl für die Rotation als auch für die Elliptizität. Die Verzerrungen (wie z. B. in Abb. 7.4) haben ihren Ursprung in den optischen Komponenten und in der Analysemethode und sind somit unabhängig vom Einfallswinkel. Als Konsequenz verschwinden die nichtlinearen

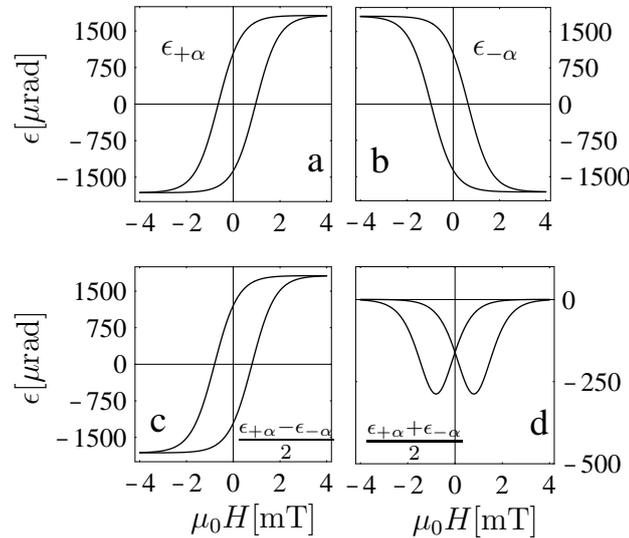


Abbildung 7.7: Simulation von Messungen in gespiegelter Geometrie. Der Einfallswinkel ist $+\alpha$ in (a), $-\alpha$ in (b). Die angenommene Elliptizität ist $2000 \mu\text{rad}$ (bei $\vartheta = 6.28 \text{ mrad}$). In beiden Fällen (a), (b) ist die Elliptizität nach der Simulation der optischen Elemente und Auswertung der Daten mit Gl. 7.10 geringfügig kleiner als der Eingabewert. Die Hystereseurve wird verzerrt. In (c) reproduziert die halbe Differenz aus (a) und (b) die ursprüngliche Form der Ausgangsdaten. In (d), der halben Summe der Daten aus (a) und (b), finden sich sehr starke Verzerrungen.

Fehler fast vollständig in der Differenz aus zwei Messungen mit entgegengesetztem Einfallswinkel. Die Form der zugrundeliegenden Hystereseurve wird mit nur geringen Fehlern reproduziert. Im Gegensatz dazu finden sich im symmetrischen Signal, der Summe der beiden Messungen, praktisch alle Verzerrungen. Ein Beispiel hierfür gibt die Simulation in Abb. 7.7. Die Messungen mit positivem und negativem Einfallswinkel für die Rotation und die Elliptizität der Fe/Si(001) Probe sind in Abb. 7.8 (a) und

(b) gezeigt. Die antisymmetrische Kurve zeigt eine Rotation von 1200 μrad . Die El-

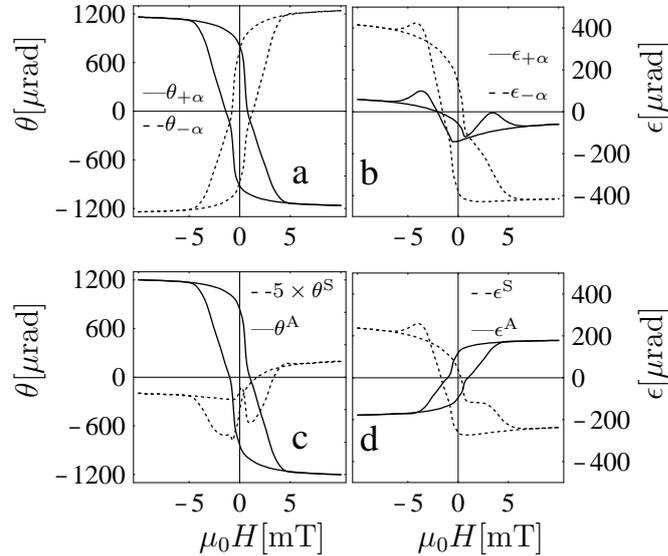


Abbildung 7.8: Kerr-Messungen an der Eisenprobe aus Abb. 7.6 (a), (b) sowie die berechneten symmetrischen und antisymmetrischen Komponenten (c), (d). In (a) ist die Rotation θ aufgetragen; zum einen mit dem Einfallswinkel $+\alpha$ (s. Abb. 7.1) und zum anderen in gespiegelter Geometrie ($-\alpha$); d. h. die Position von Laser und Detektor sind vertauscht. In (b) sind die analogen Messungen zu (a), jedoch mit $\lambda/4$ -Plättchen, vorgenommen und somit die Elliptizität gemessen worden. Die Graphen (c) und (d) zeigen die berechneten symmetrischen (Index S) und antisymmetrischen (Index A) Komponenten, $\theta^S = \frac{\theta_{+\alpha} + \theta_{-\alpha}}{2}$ und $\theta^A = \frac{\theta_{+\alpha} - \theta_{-\alpha}}{2}$ in (c), und analog für ϵ in (d).

liptizität von ca. 150 μrad beträgt nur etwa ein Achtel der Rotation (Abb. 7.8 (c) und (d)). Die verzerrungsfreien antisymmetrischen Komponenten in Rotation und Elliptizität weisen, bis auf eine Spiegelung, die gleiche Form auf (θ^A in Abb. 7.8 (c) und ϵ^A in Abb. 7.8 (d)). Es ist daher anzunehmen, daß dieses die wahre Form der Hysteresekurve ist, welche das magnetische Verhalten der Probe in der Probenebene zeigt. Eine zusätzliche z -Komponente der Magnetisierung wäre im symmetrische Teil zu finden. Der Vergleich von Abb. 7.7 (d) und θ^S in Abb. 7.8 (c) zeigt, daß dieser Teil praktisch nur aus Artefakten der linearisierten Analyse besteht. Beide Kurven weisen eine „Schmetterlingsform“ auf. Die Elliptizität zeigt ein anderes Verhalten. In einer Feldrichtung ist ein Überschwinger zu beobachten (Abb. 7.8 (d)). Die symmetrische Komponente der Elliptizität ist deutlich größer als die antisymmetrische.

Diese optischen und magnetischen Eigenschaften lassen sich direkt aus den vier gemessenen Hysteresekurven herleiten, ohne daß Annahmen nötig wären. Dennoch lassen sich die Hysteresekurven aus Abb. 7.8 mittels Simulationen nicht exakt reprodu-

zieren. Drei weitere Annahmen, motiviert durch die Form der Kurven von θ^S und ϵ^S in Abb. 7.8, sind erforderlich, um eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung zu erreichen.

- Eine von Null verschiedene z -Komponente der Magnetisierung liegt tatsächlich vor. Dieses könnte die irreguläre Form der Elliptizität in Fig. 7.8 (b) erklären.
- Die symmetrische Komponente der Kerr-Rotation ist klein im Vergleich zur antisymmetrischen. Im Gegensatz dazu sollen die symmetrische und antisymmetrische Komponente der Elliptizität von gleicher Größenordnung sein. Beide Annahmen begründen sich in den Intensitätsverhältnissen im Experiment (Fig. 7.8). Der Winkel der Magnetisierung, der zur z -Komponente führt, soll konstant sein. Dann ist die Form der symmetrischen und antisymmetrischen Komponente gleich.
- Während des Ummagnetisierungsvorgangs tritt ein zusätzliches Signal in der symmetrischen Komponente auf, die anzeigt, daß die Ummagnetisierung über eine senkrechte Magnetisierung vollzogen wird. In diesem Fall gibt es Abweichungen von der Annahme, die z -Komponente der Magnetisierung sei konstant.

In Simulationen, welche die oben genannten Annahmen berücksichtigen, wird eine deutliche Übereinstimmung mit den experimentellen Kurven aus Abb. 7.8 gefunden. Um die wahre Form der Hysteresekurven zu erhalten, müssen Hysteresekurven an die Meßdaten angepaßt werden. Dieses geschieht mittels eines iterativen Algorithmus, basierend auf einer nichtlinearen Optimierung nach den kleinsten Fehlerquadraten [119]. Der Algorithmus sucht diejenigen Kurven, also Elliptizität und Rotation als Funktion des angelegten Feldes, welche nach der Simulation des optischen Aufbaus und Auswertung mit Gl. 7.10 die Kurven in Abb. 7.8 (a) und (b) reproduzieren. Entsprechend der drei obigen Annahmen, sind die symmetrische und antisymmetrische Kerr-Elliptizität (Abb. 7.8 (d)) gute Ausgangswerte für den iterativen Prozeß. Die Anpassung erfolgt an die Meßdaten, also an Intensitäten. Die gemessene Intensität hängt gemäß den Gln. 7.7 und 7.8 von der eingestrahlten Intensität I_0 ab. Da die vier Messungen aus Abb. 7.8 nicht gleichzeitig durchgeführt wurden, unterscheiden sich die Intensitäten I_0 . Eine gute Schätzung dieser Intensitäten ist erforderlich, da nichtlineare iterative Algorithmen divergieren oder schwingen können, wenn die Anfangswerte stark von den wahren Werten abweichen. Die Annahme, daß die symmetrischen bzw. antisymmetrischen Kurven jeweils die gleiche Form haben, ist leicht zu erfüllen: Es werden Skalenfaktoren eingeführt, die den Faktor zwischen symmetrischer bzw. antisymmetrischer Rotation und Elliptizität angeben. Die Startwerte der Skalenfaktoren werden zu 0 and -8 gewählt, motiviert durch die Kurven in Abb. 7.8.

Zunächst verbessert der Algorithmus jeden Punkt der Hysteresekurven. Im nächsten Schritt werden die eben besprochenen Skalenfaktoren sowie die Intensitäten I_0 neu berechnet. Diese Schritte werden wiederholt bis die Rechnung konvergiert. Da der Algorithmus den Fehler aller Punkte der Hysteresekurve unabhängig voneinander verbessert, muß das Ergebnis weder kontinuierlich noch symmetrisch bezüglich der mittleren Intensität sein.

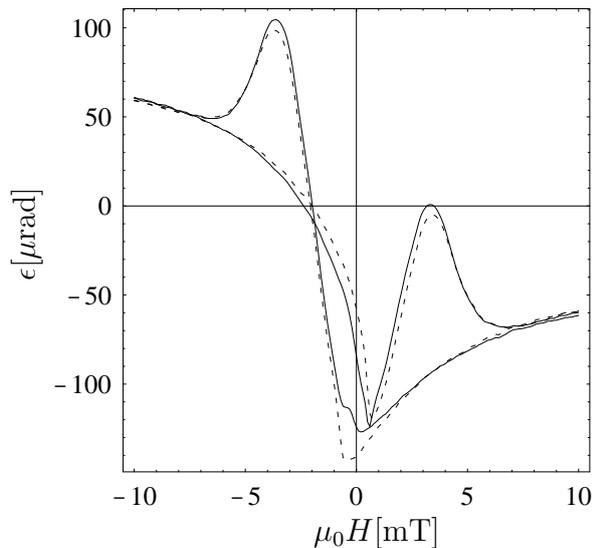


Abbildung 7.9: Die gemessene Elliptizität (---), ausgewertet mit Gl. 7.10 und die simulierte Hysteresekurve (—), die ebenfalls mittels Gl. 7.10 aus den iterativ angepaßten Kurven in Abb. 7.10 hervorgegangen ist.

Der berechnete Skalenfaktor für die antisymmetrische Elliptizität und Rotation ist -6.75 , für die symmetrischen Kurven -0.13 . Die simulierte Hysteresekurve für $\epsilon_{+\alpha}$, nach der Auswertung mit Gl. 7.10, wird in Abb. 7.9 mit der gemessenen Kurve verglichen. Die Abweichungen zwischen Anpassung und Messung der weiteren Kurven aus Fig. 7.8 (a) und (b) ist derart klein, daß diese nicht gezeigt werden.

Die Anpassung liefert die eigentliche, nicht gemischte Kerr-Rotation und Elliptizität. In Abb. 7.10 sind diese mit den Meßdaten, welche mit Gl. 7.10 ausgewertet wurden, verglichen. Dieser Vergleich zeigt nur geringe Unterschiede zwischen der gemessenen, linear ausgewerteten und angepaßten symmetrischen Kurve (Abb. 7.10 (b)). Im Gegensatz dazu sind starke Unterschiede für die antisymmetrischen Kurven zu beobachten. Die Abweichungen treten insbesondere im Bereich der Ummagnetisierung auf (Abb. 7.10 (a)). Der angepaßte Datensatz für den symmetrischen Teil der Elliptizität erscheint jedoch immer noch irregulär. Die große Amplitude zeigt aber, daß tatsächlich $M_z \neq 0$ insbesondere während des Ummagnetisierungsvorganges gilt. Wird angenommen, daß sich die Magnetisierung in einer Ebene dreht, die einen festen Winkel zur Probenoberfläche hat und nur Abweichungen während des Ummagnetisierens auftreten, so sollte die symmetrische und die antisymmetrische Hysteresekurve die gleiche

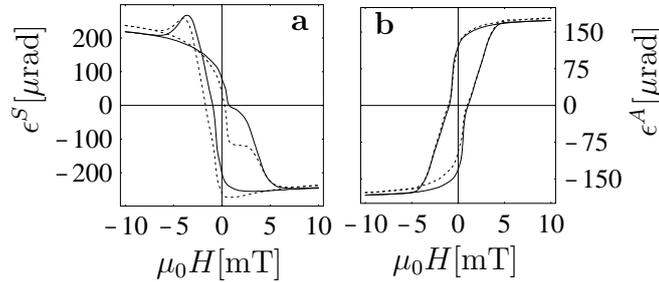


Abbildung 7.10: Vergleich der symmetrischen (a) und antisymmetrischen (b) Komponente der Elliptizität: aus den Messungen und mit Gl. 7.10 ausgewertet (---); iterativ angepaßt (—) unter Verwendung der Gl. 7.8 und Gl. 7.7. Die antisymmetrischen Kurven zeigen nur geringe Unterschiede, während der symmetrische Teil starke Korrekturen erfordert.

Form aufweisen. Um die zusätzliche z -Komponente durch den Ummagnetisierungsprozeß zu separieren, wird deshalb eine Hysteresekurve mit der Form analog zu derjenigen aus Abb. 7.10 (b) subtrahiert. Der Subtrahend wird derart skaliert, daß das Ergebnis eine möglichst hohe Symmetrie aufweist. Nachdem diese Kurve subtrahiert wurde, verbleibt derjenige Teil, der seinen Ursprung in der zusätzlichen z -Komponente der Magnetisierung beim Ummagnetisieren hat. Diese Kurve zeigt zwei deutliche Ausschläge während der Ummagnetisierung, welche aber das gleiche Vorzeichen aufweisen (Abb. 7.11). Die z -Komponente zeigt somit für beide Ummagnetisierungsvorgänge in die gleiche Richtung. Dieses könnte die Ursache in einem kleinen Restfeld oder einer Feldinhomogenität am Ort der Probe haben. Eine zweite Auffälligkeit ist das deutlich negative Signal für $H = 0$ mT. Dieses ist korreliert mit der größten Abweichung zwischen den beiden Kurven in Abb. 7.9. Derartige Fehler treten auf, wenn die Messungen nicht gleichzeitig durchgeführt werden. Eine geringe Verschiebung entlang der Abszisse führt insbesondere an steilen Flanken zu großen Fehlern. Der genannte Fehler gehört ebenfalls zu einer ansteigenden Flanke in Abb. 7.8.

Mit all den hier diskutierten Informationen kann prinzipiell das magnetische und magneto-optische Verhalten der Eisenprobe beschrieben werden. Das Ummagnetisierungsverhalten sowie Elliptizität und Rotation in Sättigung können erfaßt werden. Die Probe weist eine antisymmetrische Kerr-Rotation auf, die deutlich größer als die antisymmetrische Kerr-Elliptizität ist. Eine z -Komponente der Magnetisierung ist vorhanden. Die daraus resultierende symmetrische Rotation ist jedoch sehr klein, während die symmetrische Elliptizität ebenso groß wie die antisymmetrische ist. Die symmetrische Elliptizität zeigt darüber hinaus Überhöhungen während der Ummagnetisierung. Aus diesem Verhalten kann auf eine Ummagnetisierung über eine senkrechte Magnetisierung geschlossen werden.

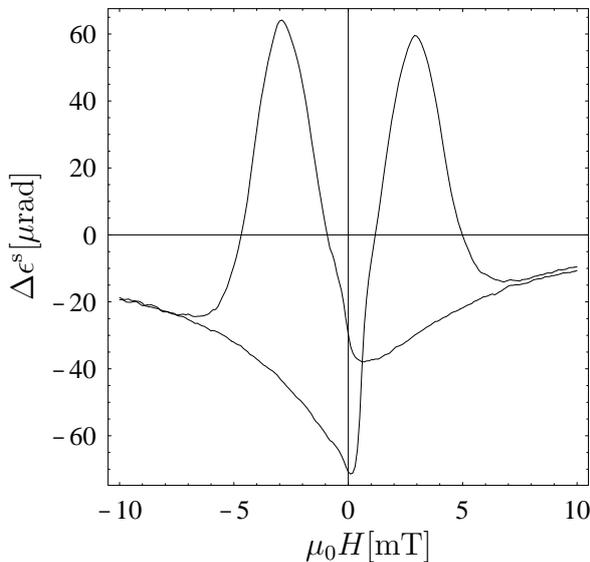


Abbildung 7.11: Der symmetrische Anteil der angepaßten Elliptizität, wenn eine Hysteresekurve mit der Form des antisymmetrischen Signals subtrahiert wird.

Der in diesem Abschnitt vorgestellte Lösungsweg erfordert Annahmen, die sehr allgemein formuliert wurden, so daß er für eine Vielzahl von Problemen anwendbar ist. Die Magnetisierung sollte jedoch größtenteils in der Ebene liegen. Ebenso ist es vorteilhaft, wenn die Formen der symmetrischen und antisymmetrischen Hysteresekurven nicht allzusehr voneinander abweichen. Bei starken Unterschieden ist zu erwarten, daß der iterative Algorithmus versagt. Dieses wird definitiv geschehen, wenn es ausschließlich eine z -Komponente der Magnetisierung gibt.

Des weiteren ist die Berechnung der Elliptizität und Rotation nur möglich, wenn alle vier Messungen aus Abb. 7.8 zur Verfügung stehen. Für *in-situ* Messungen im Vakuum ist, als Folge von doppelbrechenden Fenstern, ein $\lambda/4$ -Plättchen unvermeidlich. Es kann also nur die Elliptizität, mit einer Beimischung der Rotation, gemessen werden. Dennoch erlauben zwei Messungen in gespiegelter Geometrie zumindest die unverzerrte Elliptizität zu bestimmen. Ein Rückschluß auf eine z -Komponente der Magnetisierung ist auf diese Weise jedoch nicht möglich.

Es konnte in diesem Abschnitt gezeigt werden, daß die magnetische Information in Hysteresekurven, bei denen sich Elliptizität und Rotation stark mischen, dennoch zugänglich ist. Des weiteren kann die Nichtlinearität des Analysators in Kauf genommen werden, um das Signal-Rausch-Verhältnis zu verbessern.

Zusammenfassung und Ausblick

Um ein umfassendes theoretisches Verständnis der Streufelder und der Streufeldwechselwirkung polarisierter (magnetischer) Nanostrukturen zu erhalten, die z. B. in der Halbleiterphysik oder der Quantenoptik von Bedeutung sind, wurden in dieser Arbeit Teilchen der unterschiedlichsten Formen und Magnetisierungsrichtungen auf periodischen und quasiperiodischen Gittern unterschiedlicher Symmetrie untersucht. Als Beispiel wurden Systeme, die experimentell in der Grundlagenforschung relevant oder zumindest mit bekannten Techniken zu überprüfen sind, untersucht. Die Ergebnisse sind aber skalierbar. Dazu zählen Magneto-Transport im periodischen Potential, atom-optische Elemente (Quantenoptik), strukturierte Speichermedien und Moleküladsorbate. Drei wesentliche Aspekte wurden bearbeitet: Streufelder polarisierter Teilchen, angeordnet auf periodischen Gittern, Ordnungsphänomene durch Streufeldwechselwirkung und streufeldinduzierte Anisotropie in periodischen und quasiperiodischen Gitteranordnungen.

Zunächst wurde das Streufeld polarisierter eindimensionaler und zweidimensionaler Gitter untersucht. Mittels klassischer Potentialtheorie sowie Fourier-Methoden sind die gebräuchlichsten, d.h. vergleichsweise einfach herzustellenden Gitter, systematisch untersucht worden. Hierzu gehören unter anderem das Rechteck-, das zentrierte Rechteck-, das Dreieck- und, als Symmetrieunterklasse, das Honigwabengitter. Aus den Rechnungen folgen allgemeine Aussagen über Symmetrien, Strukturen und Strukturgrößen regelmäßig angeordneter magnetischer Teilchen. Das Ziel bei der Herstellung polarisierter Nanostrukturen ist üblicherweise eine möglichst große Feldmodulation in einem festen Abstand. Werden Strukturperioden und Strukturdicken angestrebt, die kleiner sind als der Abstand, in dem die Modulation erzeugt werden soll, so wird nur das Fernfeld des magnetischen Gitters genutzt, das exponentiell mit dem Abstand fällt. In den meisten Fällen ist die Feldkomponente senkrecht zur Ebene des Gitters ausschlaggebend. Wenn die polarisierten Strukturen hinreichend dick sind, erzeugt eine senkrechte Polarisation meist das größere Feld. Ist die Dicke zu gering, kompensieren sich die Felder von Vorder- und Rückseite der magnetischen Struktur. Ein Vergleich

von einfachem und zentriertem Gitter, die beide lithographisch herstellbar sind, ergibt, daß das zentrierte Gitter stets größere Modulationen erzeugt. Darüber hinaus ist die optimale Strukturgröße der magnetischen Teilchen im einfachen Gitter von dem Abstand, in dem die Modulation optimiert werden soll, abhängig. Im Gegensatz dazu liefert das zentrierte Gitter immer bei halber Flächenfüllung, dem Schachbrettmuster, optimale Ergebnisse.

Auf sehr kleinen Längenskalen wird in naher Zukunft die Strukturierung durch Selbstorganisation stattfinden. Aus diesem Grund sind ebenfalls Gitter mit dreizähliger Symmetrie untersucht worden. Von besonderer Bedeutung sind dabei das einfach dreizählige und das Honigwabengitter. Beide Gitter lassen sich durch Selbstorganisation, Diblock-Kopolymere oder *nano sphere lithography*, herstellen und erzeugen im optimalen Fall nahezu identische Feldmodulationen. Während aber das Honigwabengitter die maximale Strukturgröße erfordert, ist die ideale Größe für das einfache Dreieckgitter, wie beim einfachen Rechteckgitter vom Abstand abhängig. Da Mizellen aus Diblock-Kopolymeren eine Kontrolle des Flächenfüllfaktors zulassen, wird in naher Zukunft eine experimentelle Umsetzung der theoretischen Ergebnisse dieser Arbeit möglich sein.

Die Fourier-Entwicklung kann auf unregelmäßige Strukturen ausgeweitet werden, um z. B. Kantenrauhigkeiten oder uneinheitliche Dicken in „Tropfenformen“ zu erfassen. Die Ergebnisse mikromagnetischer Rechnungen können dazu dienen, die magnetische Ladungsverteilung inhomogen magnetisierter Teilchen zu bestimmen. Alle Verteilungen, die eine Spiegelsymmetrie aufweisen, können mit den Theorien der vorliegenden Arbeit behandelt werden.

Eine wesentliche Aufgabe bestand darin, optimale Geometrien für eine maximale Feldmodulation zu finden. In diesem Zusammenhang kann eine zusätzliche weichmagnetische Schicht, den Fluß magnetischer Strukturen zurückführen (das Prinzip der Spiegelladungen) und so die Feldmodulation in einer Ebene zwischen der weichmagnetischen Schicht und den magnetischen Strukturen erhöhen. Um den quantitativen Einfluß zu bestimmen, sind ebenfalls mikromagnetische Rechnungen erforderlich.

Zusätzlich zu der Berechnung der optimalen Geometrie für ein maximales Streufeld wurde die Streufeldwechselwirkung der Strukturen behandelt. Für eine große geometrische Klasse polarisierter Körper konnte eine Methode zur analytischen Berechnung der Multipolmomente entwickelt werden. In vielen Fällen sind Vorhersagen über die Multipolmomente, basierend auf der Teilchensymmetrie, möglich. In der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, daß für sehr hohe Strukturichten, also geringe Teilchenabstände, mehr als nur die Dipol-Näherung der Multipolentwicklung zu

berücksichtigen ist und daß die höheren Ordnungen merkliche Beiträge zur magneto-statischen Wechselwirkung liefern. Diese zusätzliche Wechselwirkungsenergie gab den Anlaß Ordnungsphänomene und Anisotropie, die ihren Ursprung in Multipolmomenten haben, zu berechnen. Dabei beschränken sich die Ordnungsphänomene fast ausschließlich auf axiale Multipole. Die Vielzahl der Kombinationen und möglichen Symmetrien für Multipole hoher Ordnung macht eine systematische Behandlung aller Kombinationen nahezu unmöglich. Im Gegensatz dazu hat aber z. B. der Vergleich von axialen und planaren Quadrupolen gezeigt, daß die rotationssymmetrischen Multipole den Charakter der Wechselwirkung der entsprechenden Ordnung hinreichend beschreiben. Um die Ordnungsphänomene zu berechnen, wurde ein Monte Carlo-Programm entwickelt, mit dem sich prinzipiell beliebige Multipolwechselwirkungen auf beliebigen Gittern berechnen lassen. In dieser Arbeit beschränken sich die Rechnungen bezüglich der Ordnungsphänomene jedoch auf das zweidimensionale Quadrat- und das Dreieckgitter. Beide Systeme spielen eine große Rolle in der Oberflächenphysik und -chemie von Adsorbaten, sowie der Selbstorganisation von z. B. geladenen oder polarisierten elliptischen Teilchen, Mizellen oder Kolloiden.

Für die Momente bis zum Oktopolmoment konnten frühere Monte Carlo- sowie *Mean Field*- Rechnungen bestätigt und ergänzt werden. So konnten für quadrupolare Systeme auf einem Dreieckgitter Domänenwände vorhergesagt werden, die aus technischen Gründen in den früheren Rechnungen nicht gefunden werden konnten. Die systematische Untersuchung axialer Multipole erlaubt dabei allgemeine Vorhersagen über die Ordnung im Grundzustand. Axiale Multipole ungerader Ordnung bilden auf beiden Gittertypen Ketten, die auf dem Dreieckgitter parallel auf dem Quadratgitter antiparallel verlaufen. In beiden Fällen bilden sich Domänen mit langreichweitiger Ordnung aus. Genau diese langreichweitige Ordnung wird in Systemen streufeldgekoppelter, magnetischer Teilchen gefunden. Je nachdem ob es sich um eine quasi ferromagnetische oder quasi antiferromagnetische Ordnung handelt, wird diese jedoch als Superferromagnetismus bzw. Superantiferromagnetismus bezeichnet. Die Ursache dieser Ordnungsphänomene ist noch nicht vollständig geklärt. Der Einfluß von Oktopolmomenten als Folge der endlichen Ausdehnung der Teilchen bietet einen theoretischen Ansatz. Auch kann aufgrund der Ausrichtung von Domänen in bezug auf die Achsen des Gitters, auf dem die Momente angeordnet sind, auf eine Anisotropie geschlossen werden. Momente gerader Ordnung zeigen auf dem Quadratgitter Rechteckmuster, wobei die Winkel zum Gitter mit der Ordnung variieren. Auf dem Quadratgitter finden sich „Fischgrätenmuster“, wobei der Winkel in der Struktur von der Ordnung abhängt. Alle Ordnungen liegen in der Ebene. Die einzige Ausnahme ist der Quadrupol auf dem Dreieckgitter, der vom „Fischgrätenmuster“ abweicht und eine „Windradkonfiguration“, die eine Vielzahl von Domänen zuläßt, zeigt. Bei genauer Betrachtung der Symmetrie ist

aber die enge Verwandtschaft von ‘Windradkonfiguration‘ und ‘Fischgrätenmuster‘ zu erkennen. Grundsätzlich wird die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung mit steigender Multipolordnung immer bedeutender, und mehrdomänige Zustände, die energetisch nahe am Grundzustand liegen, verschwinden. Mittels der durchgeführten Rechnungen konnten mehrere experimentelle Befunde bestätigt werden, darunter die quadrupolare Ordnung von H_2 -Moleküladsorbaten sowie die oktagonale Ordnung von Kompaßnadelmodellen. Andere Arbeiten, welche die beobachteten Ordnungsphänomene auf einzelne Multipolordnungen zurückgeführt hatten, konnten widerlegt werden.

Die Vielzahl von Anordnungen und Winkeln, die bereits für Multipolmomente bis zum Oktopolmoment zu beobachten sind, lassen hoffen, daß man derartige Ordnungsphänomene nutzen kann, um Selbstorganisationsprozesse zu unterstützen oder gar erst zu erzwingen.

In Zukunft gilt es, den Monte Carlo-Algorithmus zu optimieren, um die Ordnungsphänomene gezielt zu untersuchen. Interessant sind hierbei insbesondere Phasenübergänge. So ließe sich mittels Monte Carlo-Rechnungen der Einfluß verschiedener Multipolkomponenten auf kritische Phänomene in Systemen untersuchen, die z. B. als Speichermedien in Frage kommen. Zusätzlich zu der Vielzahl an Variationsmöglichkeiten und Fragestellungen in zwei Dimensionen, verbleibt darüber hinaus der Bereich dreidimensionaler Gitter.

Neben Ordnungseffekten macht sich die Wechselwirkung verschiedener Multipolmomente in streufeldgekoppelten Systemen auch durch eine Anisotropie bemerkbar. Die Wechselwirkungsenergie einer kohärenten Ausrichtung der Multipole ist abhängig vom Winkel der Ausrichtung, der Ordnung der Multipole und der Symmetrie des Gitters, auf dem die Multipole angeordnet sind. Diese Anisotropie sollte, zur Bestätigung der theoretischen Ergebnisse, leicht meßbar sein. Aus diesem Grund wurde für axiale Multipole die Anisotropie systematisch für Gitter unterschiedlicher Symmetrie untersucht. Es wurde numerisch gezeigt, daß Multipolmomente nur eine Anisotropie zulassen, deren Symmetrie kleiner oder gleich der Ordnung des Momentes ist. Die Entwicklungsterme der Anisotropie lassen sich dabei nach Drehsymmetrien klassifizieren. Es sind nur diejenigen von Null verschieden, die ein Vielfaches der Anzahl äquivalenter Spiegelachsen des zugrundeliegenden Gitters sind.

Um die multipolinduzierte Anisotropie zu vermessen, wurden die Möglichkeiten, welche der magneto-optische Kerr Effekt bietet, untersucht. Die Anisotropie läßt sich sowohl mittels Hysteresekurven als auch durch Suszeptibilitätsmessungen bestimmen. Bekannte Verfahren wurden erweitert, um die Präzision der Messung zu erhöhen. Die Anwendbarkeit der Verfahren wurde an Simulationen getestet. Darüber hinaus besteht

die Möglichkeit die Methoden weiter zu verbessern, indem höhere Ordnungen in der Näherung des Iterationsverfahrens berücksichtigt werden.

Insgesamt konnte die Theorie der Streufelder, der Streufeldwechselwirkung und eine Vielzahl daraus resultierender Effekte untersucht werden. Für konkrete Beispiele konnten optimale Geometrien zur Erzeugung maximaler Feldmodulationen gefunden werden. Da die Theorie skaleninvariant ist, lassen sich die Ergebnisse leicht verallgemeinern. Die Ordnungsphänomene der Monte Carlo-Rechnungen erklären Anordnungen von Moleküladsorbaten ebenso wie superferromagnetischen (superantiferromagnetische) Phasen in streufeldgekoppelten Systemen magnetischer Teilchen. Die vorhergesagte multipolinduzierte Anisotropie läßt sich im Prinzip leicht experimentell überprüfen. Hierzu wurde ein Experiment, welches den magneto-optischen Kerr Effekt ausnutzt, vorgeschlagen, so daß auf eine baldige experimentelle Bestätigung zu hoffen ist.

Literaturverzeichnis

- [1] A. Jordan, P. Wust, and H. Föhling, *Int. J. Hyperthermia* **9**, 51 (1993).
- [2] A. Jordan, R. Scholz, P. Wust, H. Föhling, and R. Felix, *J. Magn. Magn. Mater.* **201**, 413 (1999).
- [3] P. D. Ye, D. Weiss, R. R. Gerhardt, M. Seeger, K. von Klitzing, K. Eberl, and H. Nickel, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3013 (1995).
- [4] P. D. Ye, D. Weiss, and R. R. Gerhardt, *J. Appl. Phys.* **81**, 5444 (1997).
- [5] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [6] J. Reichel, W. Hänsel, and W. T. Hänsch, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 3398 (1999).
- [7] T. J. Davis, *J. Opt. B* **1**, 408 (1999).
- [8] G. I. Opat, S. J. Wark, and A. Cimmino, *Appl. Phys. B* **54**, 396 (1992).
- [9] A. Trombettoni and A. Smerzi, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2353 (2001).
- [10] K. Berg-Sørensen and K. Mølmer, *Phys. Rev. A* **58**, 1480 (1998).
- [11] R. Carretero-González and K. Promislow, *Phys. Rev. A* **66**, 33610 (2002).
- [12] A. Steane, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 117 (1998).
- [13] T. Calarco, H.-J. Briegel, D. Jaksch, J. I. Cirac, and P. Zoller, *Fortschr. Phys.* **48**, 945 (2000).
- [14] M. Albrecht, C. T. Rettner, M. E. Best, and B. D. Terris, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 4363 (2003).
- [15] J. P. Spatz, T. Herzog, S. Mößmer, P. Ziemann, and M. Möller, *Adv. Mater.* **11**, 149 (1999).
- [16] M. Eremtchenko, J. A. Schaefer, and F. S. Tautz, *Nature* **425**, 602 (2003).

- [17] E. Umbach, K. Glöckner, and M. Solokowski, *Surf. Sci.* **402-404**, 20 (1998).
- [18] J. C. Maxwell, *A Treatise on Electricity and Magnetism* (Oxford University Press, London, 1892), 3rd ed., vol. 1, Chapter IX.
- [19] A. Hucht, *Temperaturabhängigkeit magnetischer Anisotropien in ultradinnen Filmen* (Dissertation, Gerhard-Mercator-Universität Gesamthochschule Duisburg, August 1999).
- [20] P. Rhodes and G. Rowlands, *Proc. Leeds Phil. Liter. Soc.* **6**, 191 (1954).
- [21] Z. Málek and V. Kamberský, *Czechosl. Journ. Phys.* **8**, 416 (1958).
- [22] W. F. Druyvesteyn and J. W. F. Dorleijn, *Phillips Res. Repts* **26**, 11 (1971).
- [23] J. Kaczér and L. Murtinová, *Phys. Stat. Sol. (a)* **23**, 79 (1974).
- [24] H. J. G. Draaisma and W. J. M. de Jonge, *J. Appl. Phys.* **62**, 3318 (1987).
- [25] R. J. Blakely, *Potential Theory in Gravity & Magnetic Applications* (Cambridge University Press, 1995).
- [26] R. R. Gerhardts, *Phys. Rev. B* **53**, 11064 (1996).
- [27] K. L. Metlov, *J. Magn. Magn. Mater.* **215-216**, 37 (2000).
- [28] A. Nogaret, S. Carlton, B. L. Gallagher, P. C. Main, and M. Henini, *Phys. Rev. B* **55**, R16037 (1997).
- [29] T. Aign, P. Meyer, S. Lemerle, J.-P. Jamet, J. Ferré, V. Mathet, C. Chappert, J. Gierak, C. Vieu, F. Rousseaux, et al., *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5656 (1998).
- [30] P. Politi and G. M. Pini, *Phys. Rev. B* **66**, 214414 (2002).
- [31] P. J. Jensen and G. M. Pastor, *New J. Phys.* **5**, 68.1 (2003).
- [32] M. D. Costa and Y. G. Pogorelov, *Phys. Stat. Sol. a* **189**, 923 (2001).
- [33] J. F. Gregg, I. Petej, E. Jouguelet, and C. Dennis, *J. Phys. D* **35**, R121 (2002).
- [34] K. De'Bell, A. MacIsaac, I. N. Booth, and J. P. Whiehead, *Phys. Rev. B* **55**, 15108 (1997).
- [35] E. Y. Vedmedenko, A. Ghazali, and J.-C. S. Lévi, *Phys. Rev. B* **59**, 3329 (1999).
- [36] G. O. Zimmermann and A. K. Ibrahim, *Phys. Rev. B* **37**, 2059 (1988).

- [37] M. J. Mandell, J. Chem. Phys. **60**, 1432 (1974).
- [38] M. J. Mandell, J. Chem. Phys. **60**, 4880 (1974).
- [39] S. F. O'Shea, J. Chem. Phys. **68**, 5435 (1978).
- [40] E. Olive and P. Molho, Phys. Rev. B **58**, 9238 (1998).
- [41] K. Y. Guslienko, Phys. Lett. A **59**, 3329 (1999).
- [42] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1962).
- [43] S. Blume, *Theorie elektromagnetischer Felder* (Hütig Buch Verlag, Heidelberg, 1991).
- [44] A. Hubert and R. Schäfer, *Magnetic Domains* (Springer, Berlin, 1998).
- [45] R. Bracewell, *The fourier transform and its applications* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1965).
- [46] D. A. Varsalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum* (World Scientific, Singapore, 1988).
- [47] H. Stumpf and W. Schuler, *Elektrodynamik* (Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1981), 2. Auflage.
- [48] A. J. Stone, *The Theory Of Intermolecular Forces* (Clarendon Press, Oxford, 1996).
- [49] R. J. Buehler and J. O. Hirschfelder, Phys. Rev. **83**, 628 (1951).
- [50] P. L. A. Popelier and D. S. Kosov, J. Chem. Phys. **114**, 6539 (2001).
- [51] F. A. Scheck, *Mechanik* (Springer, Berlin, 1996).
- [52] W. Nolting, *Quantenmechanik*, vol. 5 (Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1994).
- [53] M. Jullière, Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).
- [54] E. Vélú, C. Dupas, D. Renard, J. P. Renard, and J. Seiden, Phys. Rev. B **37**, 668 (1988).
- [55] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, Phys. Rev. B **39**, 4828 (1989).

- [56] D. Weiss, K. von Klitzing, K. Ploog, and G. Weimann, *Europhys. Lett.* **8**, 179 (1989).
- [57] D. Osadchy and J. E. Avron, *J. Math. Phys.* **42**, 5665 (2001).
- [58] B. Nikolaus, O. Sempregz, and P. Das, *193 nm Microlithography and DUV Light Source Design* (ICG Publishing, Ltd., London, 1999), lithography Resources.
- [59] M. Park, C. Harrison, P. M. Chaikin, R. A. Register, and D. H. Adamson, *Science* **276**, 1401 (1997).
- [60] R. Moskowitz and E. Della Torre, *IEEE Trans. Mag.* **MAG-2**, 739 (1966).
- [61] A. Aharoni, *Introduction to the Theory of Ferromagnetism* (Clarendon Press, Oxford, 1996).
- [62] J. H. van Fleck, *Rev. Mod. Phys.* **17**, 27 (1945).
- [63] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Clarendon Press, Oxford, 1947).
- [64] W. F. Brown Jr., *Phys. Rev.* **105**, 1479 (1957).
- [65] W. B. Zeper and F. J. A. M. Greidanus, *J. Appl. Phys.* **65**, 4971 (1989).
- [66] R. C. Weast, ed., *Handbook of Chemistry and Physics* (CRC Press, Inc., Boca Raton, 1987), 68th ed.
- [67] G. Garreau, F. Farle, E. Beaurepaire, and K. Baberschke, *Phys. Rev. B* **55**, 330 (1997).
- [68] H. P. Oepen, S. Knappmann, and W. Wulfhekel, *J. Magn. Magn. Mater.* **148**, 90 (1995).
- [69] F. O. Schumann and J. A. C. Bland, *J. Appl. Phys.* **73**, 5945 (1993).
- [70] J. Melngailis, K. Gamo, and J. Orloff, eds., *Papers from the Japan/U.S. Workshop on Formation of Ion Nanobeams and Applications to Material Processing* (Published by the American Vacuum Society through the American Institute of Physics, New York, 1998).
- [71] K. Koike, H. Matsuyama, Y. Hirayama, K. Tanahashi, T. Kanemura, O. Kitakami, and Y. Shimada, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 784 (2001).

- [72] K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, S. F. Fischer, H. Kronmüller, T. Schweinböck, D. Weiss, and U. Gösele, *J. Magn. Magn. Mater.* **249**, 234 (2002).
- [73] W. Rave and A. Hubert, *IEEE Trans. Mag.* **36**, 3886 (2000).
- [74] J. C. Hulteen and R. P. Van Duyne, *J. Vac. Sci. Technol.* **A13**, 1553 (1995).
- [75] K. Kempa, B. Kimball, J. Rybczynski, Z. P. Huang, P. F. Wu, D. Steeves, M. Sennett, M. Giersig, D. V. G. L. N. Rao, D. L. Carnahan, et al., *Nano Lett.* **3**, 13 (2003).
- [76] Y. D. Yan and E. Della Torre, *IEEE Trans. Mag.* **25**, 2919 (1989).
- [77] J. K. Ha, R. Hertel, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* **67**, 224432 (2003).
- [78] T. Mühl, D. Elefant, A. Graff, R. Kozhuharova, A. Leonhardt, I. Mönch, M. Ritschel, P. Simon, S. Groudeva-Zotova, and C. M. Schneider, *J. Appl. Phys.* **93**, 7894 (2003).
- [79] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Clarendon Press, Oxford, 1999).
- [80] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [81] E. Y. Vedmedenko, N. Mikuszeit, R. Wiesendanger, and H. P. Oepen, *J. Phys. C* (submitted 2004).
- [82] A. J. Berlinsky and A. B. Harris, *Phys. Rev. B* **40**, 1579 (1978).
- [83] M. A. Klenin and S. F. Pate, *Phys. Rev. B* **26**, 3969 (1982).
- [84] A. Brooks Harris, *Phys. Rev. B* **2**, 3495 (1970).
- [85] I. F. Silvera, W. N. Hardy, and J. P. McTrague, *Phys. Rev. B* **5**, 1578 (1972).
- [86] J. R. Brookeman, M. M. McEnnan, and T. A. Scott, *Phys. Rev. B* **4**, 3661 (1971).
- [87] C. P. Bean and J. D. Livingston, *J. Appl. Phys.* **30**, 120S (1959).
- [88] M. R. Scheinfein, K. E. Schmidt, K. R. Heim, and G. G. Hembree, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1541 (1996).

- [89] W. Kleemann, O. Petracic, C. Binek, G. N. Kakazei, Y. G. Pogorelov, J. B. Sousa, S. Cardoso, and P. P. Freitas, *Phys. Rev. B* **63**, 134423 (2001).
- [90] S. Sahoo, O. Sichelshmidt, O. Petracic, C. Binek, W. Kleemann, G. N. Kakazei, Y. G. Pogorelov, J. B. Sousa, S. Cardoso, and P. Freitas, *J. Magn. Magn. Mater.* **240**, 433 (2002).
- [91] V. E. Klymenko, V. M. Rozenbaum, V. V. Kukhtin, and O. V. Schramko, *Sol. Stat. Comm.* **88**, 373 (1993).
- [92] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [93] M. L. Néel, *Ann. géophys.* **5**, 99 (1949).
- [94] W. F. Brown Jr., *J. Appl. Phys.* **30**, 130S (1959).
- [95] R. Ammann, B. Grünbaum, and G. C. Shephard, *Discrete Comput. Geom.* **8**, 1 (1992).
- [96] R. Penrose, *Bull. Inst. Math. Appl.* **10**, 266 (1974).
- [97] URL <http://www.itap.physik.uni-stuttgart.de/~gaehler/>.
- [98] Bob.exe, URL <http://www.stephencollins.net/web/penrose/>.
- [99] P. P. Ewald, *Ann. Phys. (Leipzig)* **64**, 253 (1921).
- [100] A. Aguado and P. A. Madden, *J. Chem. Phys.* **119**, 7471 (2003).
- [101] R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and polarized light* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1977).
- [102] J. Kerr, *Phil. Mag. S. 5* **3**, 321 (1877).
- [103] J. Kerr, *Phil. Mag. S. 5* **5**, 161 (1878).
- [104] W. Voigt, *Magneto- und Elektrooptik* (B. G. Teubner, Leipzig, 1908).
- [105] M. J. Freiser, *IEEE. Trans. Mag.* **4**, 152 (1968).
- [106] Z. Q. Qiu and S. D. Bader, *Nonlinear Optics in Metals* (Clarendon Press, Oxford, 1998), chap. 1.
- [107] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Elektrodynamik der Kontinua*, vol. 8 of *Lehrbuch der Theoretischen Physik* (Akademie-Verlag, Berlin, 1985).

- [108] J.-P. Pérez, *Optik* (Spektrum Akademischer Verlag GmbH, Heidelberg, 1996).
- [109] J. Zak, E. R. Moog, and S. D. Bader, Phys. Rev. B **43**, 6423 (1991), erratum, Phys. Rev. B **43**, 6423 (1991).
- [110] K. Postava, J. F. Bobo, M. D. Ortega, B. Raquet, H. Jaffres, E. Snoeck, M. Goiran, A. R. Fert, J. P. Redoules, J. Pištora, et al., J. Magn. Magn. Mater. **163**, 8 (1996).
- [111] A. Berger, S. Knappmann, and H. P. Oepen, J. Appl. Phys. **75**, 5598 (1994).
- [112] S. Pütter, *Spinreorientierungsübergänge in ultradünnen Filmen: Der Einfluß von äußeren Feldern* (Dissertation, Martin-Luther Universität Halle-Wittenberg, April 2000).
- [113] R. Cowburn, J. Phys. D **33**, R1 (2000).
- [114] M. L. Meade, *Lock-in amplifiers: Principles and Applications* (Peter Peregrinus Ltd., London, 1982), 2nd ed.
- [115] H. F. Ding, S. Pütter, H. P. Oepen, and J. Kirschner, J. Magn. Magn. Mater. **212**, L5 (2000).
- [116] N. Mikuszeit, S. Pütter, and H. P. Oepen, J. Magn. Magn. Mater. **268**, 340 (2004).
- [117] H. P. Oepen, Y. T. Millev, H. F. Ding, S. Pütter, and J. Kirschner, Phys. Rev. B **61**, 9506 (2000).
- [118] G. A. Müller, R. Gupta, K.-P. Lieb, and P. Schaaf, Appl. Phys. Lett. **82**, 73 (2003).
- [119] V. Blobel and E. Lohrmann, *Statistische und numerische Methoden der Datenanalyse* (B. G. Teubner, Stuttgart, 1998).
- [120] M. Abramowitz and I. M. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications Inc., New York, 1965).
- [121] S. P. Malgonde and S. R. Bandewar, Proc. Indian Acad. Sci. (Math. Sci.) **110**, 293 (2000).

Anhang A

Abkürzungen

| | |
|--------------|--|
| Abb. | Abbildung |
| bel. | beliebig |
| bzw. | beziehungsweise |
| ca. | circa |
| dim. | dimensional (-e,-en) |
| Gl. | Gleichung |
| Gln. | Gleichungen |
| i. A. | im Allgemeinen |
| Kap. | Kapitel |
| Laser | Light amplification by stimulated emission of radiation (Lichtverstärkung durch stimulierte Emission von Strahlung) |
| ML | Monolagen |
| MOKE | magneto-optischer Kerr Effekt |
| MRAM | Magnetoresistive Random Access Memory |
| s. | siehe |
| sog. | sogenannte (-n) |
| Tab. | Tabelle |
| usw. | und so weiter |
| v. Chr. | vor Christi Geburt |
| vgl. | vergleiche |
| willk. Einh. | willkürliche Einheiten |
| z. B. | zum Beispiel |

Anhang B

Liste der verwendeten Formelzeichen

| | |
|----------------|--|
| $\cdot $ | Ist Teiler von |
| $ \cdot $ | Betrag einer komplexen Zahl |
| $\ \cdot\ $ | L_2 -Norm eines Vektors |
| $(\cdot)^*$ | Konjugiert komplexe Größe |
| $\vec{\nabla}$ | Nabla-Operator |
| a | Laterale Ausdehnung einer magnetischen Struktur (in m) Optische Konstante |
| A | Fläche (in m ²) Optische Konstante (a/d) |
| α | Azimutalwinkel Eulerwinkel Einfallswinkel |
| b | Periode eines Gitters (in m) Laterale Ausdehnung einer magnetischen Struktur (in m) Optische Konstante |
| B | Optische Konstante(b/d) |
| \vec{B} | Magnetische Flußdichte (in T) |
| β | Eulerwinkel |
| c | Optische Konstante Integrationskonstante |
| c_k | Entwicklungskoeffizient |
| C | Optische Konstante (c/d) |
| χ | Suszeptibilität |
| ∂_i | Partielle Ableitung nach der i -ten Ortskoordinate |

| | |
|---------------------------------|--|
| d | Dicke (in \mathbf{m}) Laterale Ausdehnung einer magnetischen Struktur (in \mathbf{m}) Optische Konstante |
| D | Verschiebungsstromdichte (in $\frac{\text{As}}{\text{m}^2}$) |
| $D^{i j k}(\cdot)$ | Integraloperator |
| D_{mn}^l | Wigner-D-Funktion |
| δ | Reelle Zahl ($\delta \in \mathbb{R}$) |
| $\delta_{i,j}$ | Kronecker-Symbol, $\delta_{i,j} = 1$ für $i = j$, $\delta_{i,j} = 0$ für $i \neq j$ |
| E | Energie (in \mathbf{J}) |
| \vec{E} | Elektrischer Feldvektor |
| ϵ | Kerr-Elliptizität Dielektrizitätskonstante |
| $\overleftrightarrow{\epsilon}$ | Dielektrizitätstensor |
| $\mathcal{F}(\cdot)$ | Fourier-Transformation |
| $\mathcal{F}^{-1}(\cdot)$ | Inverse Fourier-Transformation |
| \vec{F} | Feld, negativer Gradient eines skalaren Potentials |
| $F_{i j k}$ | Integral des Coulomb-Potentials |
| $G(\cdot, \cdot)$ | Greenfunktion |
| γ | Eulerwinkel Reelle Zahl ($\gamma \in \mathbb{R}$) |
| h | Höhe einer magnetischen Struktur (in \mathbf{m}) |
| $\mathcal{H}_n(\cdot)$ | Hankel-Transformation n -ter Ordnung |
| \vec{H} | Magnetfeld (in $\mathbf{A/m}$) |
| i | Ganze Zahl ($i \in \mathbb{N}$) |
| I | Intensität |
| I_{lm} | Normierte Kugelflächenfunktion |
| \vec{I} | Strom (in \mathbf{A}) |
| $\Im(\cdot)$ | Imaginärteil einer komplexen Zahl |
| j | Ganze Zahl ($j \in \mathbb{N}$) |
| \vec{J} | Magnetische Polarisation (in $\frac{\text{Vs}}{\text{m}^2}$) Stromdichte (in $\frac{\text{A}}{\text{m}^2}$) |
| \hat{J} | Drehimpulsoperator |
| J_{ij} | Austauschkonstante (in \mathbf{J}) |
| k | Ganze Zahl ($k \in \mathbb{Z}$) |
| \vec{k} | Wellenvektor (in $1/\mathbf{m}$) |
| k_B | Boltzmann-Konstante ($1.3807 \cdot 10^{-23} \mathbf{J/K}$) |

| | |
|----------------------------|---|
| κ | Reelle Zahl ($\kappa \in \mathbb{R}$) |
| | Länge (in \mathbf{m}) |
| l | Ordnung eines Tensors in Kugelkoordinaten |
| λ | Wellenlänge (in \mathbf{nm}) |
| m | Magnetische Quantenzahl eines Tensors in Kugelkoordinaten |
| \vec{m} | Magnetisches Moment (in $\mathbf{Vs m}$) |
| \vec{m}_{\parallel} | Projektion von \vec{m} in die x - y -Ebene (zweidimensionaler Vektor) |
| \vec{M} | Magnetisierung (in $\frac{\mathbf{A}}{\mathbf{m}}$) |
| \vec{M}_{\parallel} | Projektion von \vec{M} in die x - y -Ebene (zweidimensionaler Vektor) |
| M_S | Sättigungsmagnetisierung (Kobalt: $\mu_0 M_S = 1.78 \text{ T}$ [66]) |
| μ_0 | Vakuumpermeabilität ($4\pi \cdot 10^{-7} \frac{\mathbf{Vs}}{\mathbf{A m}}$) |
| $\overleftrightarrow{\mu}$ | Suszeptibilitätstensor |
| n | Ganze Zahl ($n \in \mathbb{N}$) |
| | Ordnung einer Reihenentwicklung |
| | Magnetische Quantenzahl eines Tensors in Kugelkoordinaten |
| | Komplexer Brechungsindex ($n \in \mathbb{C}$) |
| \vec{n} | Normalenvektor auf einer Oberfläche |
| v_{ij} | Vorzeichenfunktion ($v_{ij} = (-1)^{i+j}$) |
| ω | Reelle Zahl ($\omega \in \mathbb{R}$) |
| p | Periodizität eines Gitters oder einer Ladungsverteilung |
| | Ganze Zahl ($p \in \mathbb{N}$) |
| \vec{p} | Elektrisches Dipolmoment (in $\mathbf{As m}$) |
| P | Wahrscheinlichkeit |
| \vec{P} | Ortsvektor |
| | Elektrische Polarisierung (in $\frac{\mathbf{As}}{\mathbf{m}^2}$) |
| \hat{P} | Paritätsoperator ($\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$) |
| φ | Azimutalwinkel |
| Φ | Potential |
| Φ_K | Komplexer Kerrwinkel |
| $\hat{\Phi}$ | Fourier-Transformierte des Potentials |
| Ψ | Zweidimensionale Gitterfunktion |
| $\hat{\Psi}$ | Fourier-Transformierte der zweidimensionalen Gitterfunktion |
| q | Ladung (in \mathbf{As} , elektrisch oder \mathbf{Vs} , magnetisch) |
| \vec{q} | Wellenvektor (zweidimensional) |
| q_ϵ | Quotient der Elliptizitäten zweier Kerrmessungen |
| Q | Voigt-Konstante |

| | |
|-----------------------|---|
| Q_{lm} | Multipolmoment |
| \vec{Q} | Voigt-Vektor |
| r | Radius (in m) |
| r_{ij} | Reflexionskoeffizient mit $i, j \in \{s, p\}$ |
| \vec{r} | Ortsvektor (dreidimensional) |
| R_{lm} | Normierte Kugelflächenfunktion |
| \vec{R} | Ortsvektor |
| $\Re(\cdot)$ | Realteil einer komplexen Zahl |
| ρ | Ladungsdichte (in $\frac{As}{m^3}$, elektrisch oder $\frac{Vs}{m^3}$, magnetisch) |
| | Ortskoordinate |
| ϱ | Radius (in m) |
| $\vec{\rho}$ | Ortsvektor (zweidimensional) |
| T | Temperatur (in K) |
| $T_{l_A m_A l_B m_B}$ | Geometrischer Wechselwirkungstensor |
| θ | Polarwinkel |
| | Kerr-Rotation |
| ϑ | Azimutalwinkel |
| V | Volumen (in m ³) |
| x | Ortskoordinate |
| y | Ortskoordinate |
| Y_{lm} | Kugelflächenfunktion |
| z | Ortskoordinate |
| | Komplexe Zahl ($z \in \mathbb{C}$) |
| ζ | Ortskoordinate |

Anhang C

Äquivalenz von Elektro- und Magnetostatik

| magnetisch | | elektrisch |
|---|--|--|
| $\Delta\Phi = -\frac{1}{\mu_0}\rho$ | Poisson-Gleichung | $\Delta\Phi = -\frac{1}{\epsilon_0}\rho$ |
| $H = -\vec{\nabla}\Phi$ | Definition des Feldes | $E = -\vec{\nabla}\Phi$ |
| $\vec{B} = \epsilon_0\vec{H} + \vec{J} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$ | Felder in Materie | $\vec{D} = \epsilon_0\vec{E} + \vec{P}$ |
| $\rho_V = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}$ | Volumenladung durch Polarisation | $\rho_V = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P}$ |
| $\rho_S = \vec{n} \cdot \vec{J}$ | Oberflächenladung durch Polarisation | $\rho_S = \vec{n} \cdot \vec{P}$ |
| $E = \frac{1}{4\pi\mu_0} \int \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{\ \vec{r}_1 - \vec{r}_2\ } d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$ | Wechselwirkungsenergie | $E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{\ \vec{r}_1 - \vec{r}_2\ } d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$ |
| $[\mu_0] = \frac{\text{Vs}}{\text{Am}}$ | Vakuumkonstante | $[\epsilon_0] = \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$ |
| $[\Phi] = \text{A}$ | Potential | $[\Phi] = \text{V}$ |
| $[\rho_V] = \frac{\text{Vs}}{\text{m}^3}$ | Volumenladungsdichte | $[\rho_V] = \frac{\text{As}}{\text{m}^3}$ |
| $[\rho_S] = \frac{\text{Vs}}{\text{m}^2}$ | Flächenladungsdichte | $[\rho_S] = \frac{\text{As}}{\text{m}^2}$ |
| $[\vec{J}] = \frac{\text{Vs}}{\text{m}^2}$ | Polarisation | $[\vec{P}] = \frac{\text{As}}{\text{m}^2}$ |
| $[\vec{m}] = \text{Vsm}$ | Moment | $[\vec{p}] = \text{Asm}$ |
| $= (\text{Am}^2)$ | Lehrbuchdefinition (\vec{m}/μ_0) | |

Anhang D

Mechanisches Modell zum Ferromagnetismus

Das Phänomen des Ferromagnetismus kann klassisch nicht erklärt werden. Ferromagnetische Ordnung ist ein quantenmechanischer Vielteilcheneffekt. Dennoch werden in Schulen und Universitäten Kompaßnadelmodelle zur Verdeutlichung ferromagnetischer Ordnung herangezogen. Wie in Kap. 5 gezeigt wurde, ist die Ordnung dieser Modelle vollständig auf multipolare Wechselwirkungen zurückzuführen. Diese Modelle haben kein Äquivalent zur quantenmechanischen Austauschwechselwirkung. Es stellt sich somit die Frage, ob ein Modell möglich ist, das die Austauschwechselwirkung zumindest approximiert. Die Antwort auf diese Frage ist ja¹! Da die Austauschwechselwirkung für kleine Auslenkungen proportional zum Winkel der Auslenkung ist, liegt es nahe, eine Konstruktion mit Federn unter Ausnutzung des Hookschen Gesetzes zu verwenden. Dieses ist in Abb. D.1 skizziert. In diesem Modell sitzen die Kompaßnadeln nicht, wie bei den kommerziellen Modellen üblich, drehend gelagert auf einer Stange (Nadel). Sie sind fest auf der Stange, welche die Form einer Kurbelwelle aufweist, fixiert und die Welle selbst ist an der Basis drehbar gelagert. Zwei benachbarte Wellen sind elastisch mit einer Feder miteinander verbunden. In der Aufsicht in Abb. D.2 wird deutlich, welche geometrischen Größen das System bestimmen. Die Magnete (Spins) befinden sich in einem Abstand R voneinander. Die Welle hat einen Radius r . Die Konstruktion erlaubt eine beliebige Drehung um den Winkel θ . Solange zwei Spins kohärent drehen, ändert sich die Länge der Feder nicht. Dreht sich der zweite Spin jedoch zusätzlich um einen Winkel φ , so ändert sich die Länge der Feder von R zu ϱ . Durch einfache geometrische Überlegungen kann leicht gezeigt werden, daß folgende

¹ Das in diesem Anhang beschriebene Modell wurde von N. Mikuszeit, Dr. R. Frömter und Dr. E. Y. Vedmedenko entwickelt.

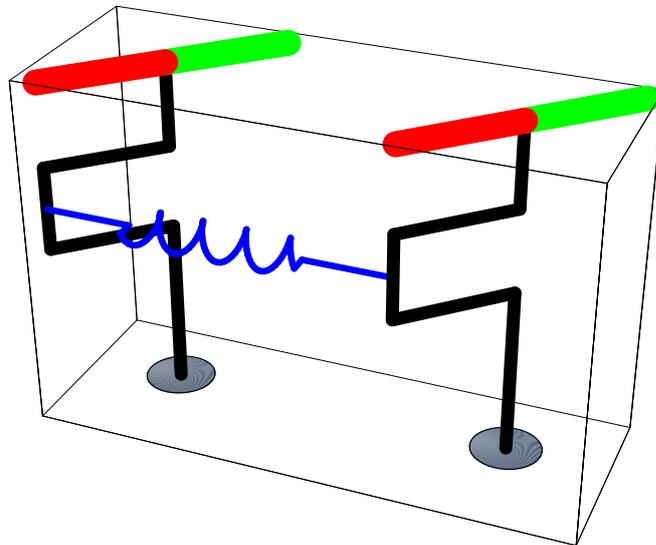


Abbildung D.1: Skizze zur mechanischen Austauschwechselwirkung. Die Spins sitzen als Magnete (*rotgrün*) auf der Spitze einer „Kurbelwelle“ und wechselwirken durch ihr Streufeld miteinander. Zwei benachbarte Spins sind durch eine Feder (*blau*) verbunden.

Beziehung gilt

$$\frac{\varrho^2}{r^2} = \frac{R^2}{r^2} + 4 \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 4 \frac{R}{r} \sin \frac{\varphi}{2} \sin \left(\theta + \frac{\varphi}{2} \right). \quad (\text{D.1})$$

Alle Längen können in Einheiten von r angegeben werden, weshalb im Folgenden $r = 1$ gesetzt wird. Die Längenänderung $\Delta R = R - \varrho = L(R, \theta, \varphi)$ ist vom Winkel θ abhängig. Durch Taylor-Entwicklung zeigt sich leicht, daß für $\theta = 90^\circ$ in erster Näherung $L(R, 90^\circ, \varphi) \approx \varphi$ gilt. Es ergibt sich ein lineares Kraftgesetz. Für $\theta = 0^\circ$ ergibt eine Näherung aber $L(R, 0^\circ, \varphi) \approx \frac{R-1}{2R} \varphi^2$. Dieses ist ein quadratisches Kraftgesetz.

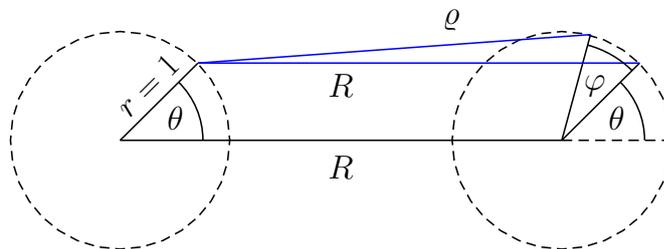


Abbildung D.2: 2D Skizze zur mechanischen Austauschwechselwirkung, sowie die wichtigen geometrischen Größen.

Das Problem des nichtlinearen Kraftgesetzes wird dadurch gelöst, daß die Welle um

eine weitere Ausbuchtung ergänzt wird, die zur ersten einen Winkel von 90° einnimmt (Abb. D.3). Mit der Längenänderung

$$L(R, \theta, \varphi) = R - \sqrt{R^2 + 4 \sin^2 \frac{\varphi}{2} - 4R \sin \frac{\varphi}{2} \sin \left(\theta + \frac{\varphi}{2} \right)} \quad (\text{D.2})$$

ist die Energie

$$E \propto (L^2(R, \theta, \varphi) + L^2(R, 90^\circ + \theta, \varphi)). \quad (\text{D.3})$$

Entwickelt man diese Lösung für große R , so ist der funktionale Zusammenhang zwischen der Energie und dem Winkel φ in niedrigster Ordnung

$$\begin{aligned} E &\propto 2(1 - \cos \varphi) \\ &= -2J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + c \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

mit $J_{ij} = 1$ und $c = 2$. Für ein kontinuierliches Vektorfeld der Magnetisierung kann somit mechanisch die Austauschwechselwirkung approximiert werden. Fehler treten erst für sehr große Winkel $\varphi \approx 180^\circ$ auf. Die Näherung wird mit wachsendem Verhältnis R/r sowie mit der Anzahl symmetrisch angeordneter Federn besser.

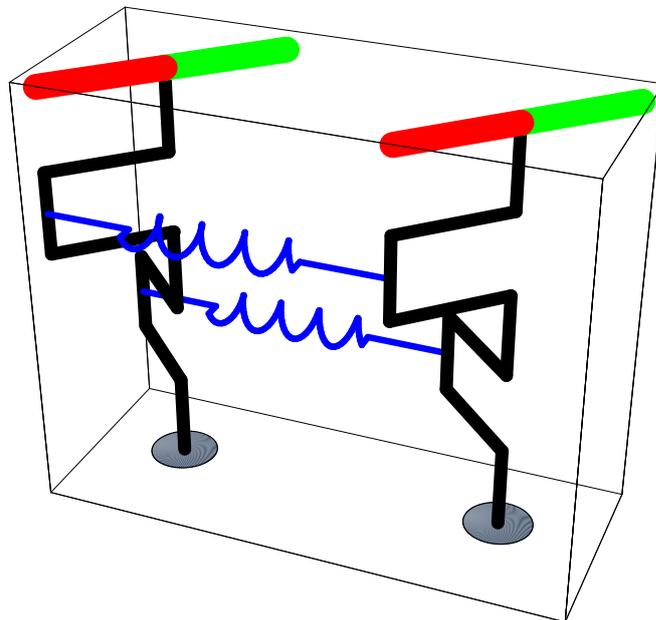


Abbildung D.3: 3D Skizze zur mechanischen Austauschwechselwirkung. Sind die Magnete klein gegenüber dem Abstand zweier „Kurbelwellen“, so approximiert dieses Modell die beiden fundamentalen Wechselwirkungen in in einem Ferromagneten: die dipolare und die Austauschwechselwirkung.

Anhang E

Eigenschaften der Fourier-Transformation

Die Fourier-Transformation wurde in Gl. 2.18 definiert. Bezüglich der Symmetrie der zu transformierenden Funktionen sind einige Eigenschaften zu nennen. Durch Einsetzen in die Definition zeigt man

$$\hat{f}(-k) = \hat{f}^*(k) \quad \text{für} \quad f(x) = f^*(x). \quad (\text{E.1})$$

Wenn darüber hinaus noch gilt

$$f(x) = f(-x) \quad \text{ist} \quad \hat{f}(k) = \hat{f}^*(k) \quad (\text{E.2})$$

und falls

$$f(x) = -f(-x) \quad \text{ist} \quad \hat{f}(k) = -\hat{f}^*(k). \quad (\text{E.3})$$

Eine reelle achsensymmetrische Funktion hat folglich eine rein reelle, eine reelle punktsymmetrische Funktion eine rein imaginäre Fourier-Transformierte.

Ist $\hat{f}(k)$ die Fourier-Transformierte von $f(x)$, so kann durch Substitution leicht gezeigt werden, daß eine lineare Transformation, bei der x in $ax + b$ übergeht, sich gemäß

$$\mathcal{F}(f(ax + b))(k) = \frac{e^{2\pi i \frac{k}{a} b}}{a} \hat{f}\left(\frac{k}{a}\right) \quad (\text{E.4})$$

transformiert.

Wichtig ist das Verhalten bezüglich Differentiation. Man zeigt mittels partieller Integration, daß gilt

$$\mathcal{F}((\partial_x)^n f(x))(k) = (2\pi i k)^n \mathcal{F}(f(x))(k). \quad (\text{E.5})$$

Die Faltung u zweier Funktionen f und g ist definiert als

$$u(x) = (f * g)(x) = \int_{\mathbb{R}} d\tau f(x - \tau)g(\tau). \quad (\text{E.6})$$

Bezüglich der Fourier-Transformation gilt der Faltungssatz

$$\mathcal{F}(u(x))(k) = \mathcal{F}(f(x))(k) \cdot \mathcal{F}(g(x))(k). \quad (\text{E.7})$$

Diese Beziehung gilt sowohl beim Übergang vom Real- zum Frequenzraum als auch umgekehrt.

Anhang F

Besselfunktionen J_n und Hankel-Transformationen \mathcal{H}_n

Eine mögliche Definition der Besselfunktion ganzzahliger Ordnung ist nach Abramowitz [120]

$$J_n(z) := \frac{i^{-n}}{\pi} \int_0^\pi d\theta e^{iz \cos \theta} \cos(n\theta). \quad (\text{F.1})$$

Für $n = 0$ vereinfacht sich diese Gleichung zu

$$\begin{aligned} J_0(z) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta e^{iz \cos \theta} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta \cos(z \cos \theta) + i \sin(z \cos \theta) \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta \cos(z \cos \theta), \end{aligned} \quad (\text{F.2})$$

da der Kosinus auf dem Intervall $[0, \pi]$ punktsymmetrisch zu $\pi/2$ ist und somit das Integral über den Sinusterm Null ergibt. Diese Definition stimmt, da der Kosinus ach-

sensymmetrisch zu $\theta = \pi$ ist, mit der folgenden Definition überein

$$\begin{aligned}
 J_0(z) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-iz \cos \theta} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^\pi d\theta e^{-iz \cos \theta} + \int_\pi^{2\pi} d\theta e^{-iz \cos \theta} \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left(2 \cdot \int_0^\pi d\theta e^{-iz \cos \theta} \right) \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta e^{-iz \cos \theta} \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta \cos(z \cos \theta) - i \sin(z \cos \theta) \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta \cos(z \cos \theta), \tag{F.3}
 \end{aligned}$$

aus den oben angeführten Symmetrieüberlegungen.

Die Besselfunktion der Ordnung Eins erhält man neben der allgemeinen Definition [F.1](#) auch als Integral der Funktion mit der Ordnung Null gemäß

$$J_1(z) = \frac{1}{z} \int_0^z s J_0(s) ds. \tag{F.4}$$

Die Besselfunktionen J_n sind die Integralkerne der Hankel-Transformation [\[121\]](#) und definiert als

$$\mathcal{H}_n(f(x))(k) := \int_0^\infty dx \sqrt{kx} f(x) J_n(kx) \quad (0 < k < \infty). \tag{F.5}$$

Hankel-Transformationen treten üblicherweise auf, wenn eine Fourier-Transformation von kartesischen zu Polarkoordinaten überführt wird.

Anhang G

Wesentliche Subroutinen des Monte Carlo-Programms

Für viele Rechnungen in dieser Arbeit war es erforderlich auf numerische Methoden zurückzugreifen. Dies sind zum einen die Monte Carlo-Methoden Kap. 5.1, welche per Definition numerisch sind, zum anderen die Fourier-Berechnungen, welche zur Streufeldoptimierung (Kap. 3) erforderlich sind. Es ist nicht zweckmäßig die vollständigen Programme abzudrucken, da sich die Grundkonzepte z. B. von Monte Carlo-Rechnungen immer ähneln (siehe Abb. G.1). Die Wechselwirkung höherer Momente erfordert im Detail spezielle Lösungen. Diese Konzepte und der jeweilig dazugehörige Ausschnitt aus dem Programm sollen im Folgenden aufgelistet werden.

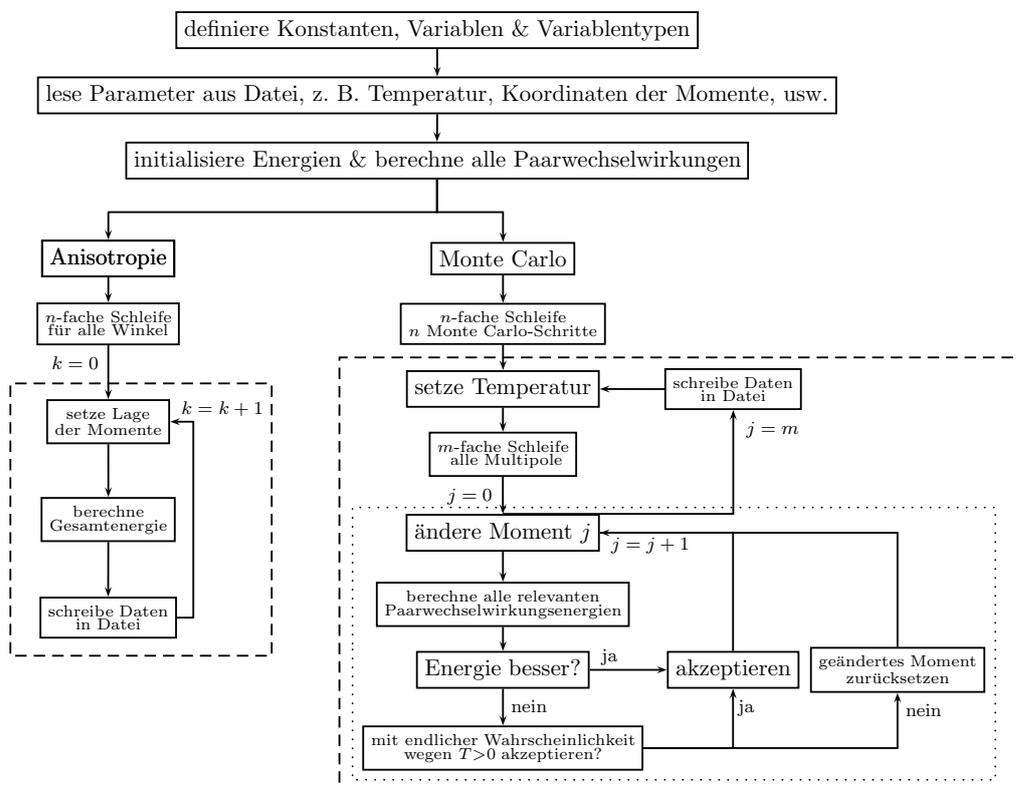


Abbildung G.1: Strukturdiagramm des C-Programms. Es können sowohl Monte Carlo-Rechnungen als auch Anisotropieberechnungen durchgeführt werden.

G.1 Konstanten und Variablentypen

Im Programm wird immer wieder die Zahl π sowie die Umrechnung von Grad in Radiant benötigt. Zur Vereinfachung werden die dazu nötigen Konstanten am Anfang definiert. Das Speichern der Multipolmomente erfordert in einer allgemeinen Programmierung, die flexibel jede Kombination von Multipolmomenten zuläßt, eine komplexe Listenstruktur. Zunächst wird einem Multipol eine Liste mit allen vorkommenden Ordnungen L zugewiesen (*MULTIPOLES*). Diese wird dann wiederum in Sublisten unterteilt, welche die einzelnen Momente (l, m) , sprich komplexe Zahlen, enthält (*QL*).

```
#define OK 1
#define DEGREE 0.017453292519943296
#define PI 3.1415926535897932

//Vektoren mit drei Komponenten
typedef struct _vec3D{
    double x;
    double y;
    double z;
}VEC3D;

//ein Moment (l,m), verweist auf nächstes Moment gleicher Ordnung
typedef struct _ql{
    int l;
    int m;
    double _Complex qlm;
    struct _ql *next;
}QL;

//das Moment der Ordnung l. enthält alle qlm und verweist auf weitere Ordnungen
typedef struct _multipoles{
    int l;
    QL *moments;
    struct _multipoles *next;
}MULTIPOLES;
```

G.2 Erstellen der Momente aus eingelesenen Daten

Die Daten der Multipole sind in einer Datei abgelegt. Diese werden von einer Funktion eingelesen und als Liste (*array*) übergeben. Die Daten sollen in dem Multipol ***mHndl* abgelegt werden.

```
void addMultipol(MULTIPOLES **mHndl, int l, double* array)
{
    MULTIPOLES *newPntr;
    MULTIPOLES *tmpPntr;

    newPntr=*mHndl;
    //falls schon einträge existieren, suche den letzten.
    if((*mHndl)!=NULL)
    {
        tmpPntr=(*mHndl)->next;

        while(tmpPntr!=NULL)
        {
            newPntr=tmpPntr;
            tmpPntr=tmpPntr->next;
        }
    }
    tmpPntr=newPntr;

    //erzeuge neues Moment der Ordnung l
    newPntr= calloc(1, sizeof( MULTIPOLES ));
    newPntr->l=l;
    //die Werte zu den einzelnen magnetischen Quantenzahlen
    //werden extern zugewiesen
    createMoments(&(newPntr->moments),l, array);
    newPntr->next=NULL;

    //falls noch keiner existiert zeigt mHndl auf den erzeugten.
    if((*mHndl)==NULL)
    {
        (*mHndl)=newPntr;
    }
}
```

```

    else //der bisher letzte muß auf den neuen verweisen
    {
        tmpPntr->next=newPntr;
    }
    return;
}
#####
//speicher die komplexen Zahlen aus array in qlm

void createMoments(QL **mHndl,int l, double* array)
{
    QL *newPntr;
    QL *tmpPntr=NULL;
    int m;
    double _Complex qlm=0;
    double c;
    double r;

    //schleife läuft rückwärts->pointer auf next ist einfach!
    for(m=l;m>=-1;m--)
    {
        newPntr= calloc(1,sizeof(QL));
        newPntr->l=l;
        newPntr->m=m;

        //lese Real- und Imaginärteil aus dem array und schreibe in qlm.
        r=array[2*(l+m)];
        c=array[2*(l+m)+1];
        qlm.re=r;
        qlm.im=c;

        //das neue Moment qlm verweist auf das letzte.
        newPntr->qlm=qlm;
        newPntr->next=tmpPntr;
        tmpPntr=newPntr;
    }

    //das Moment (alle m) das diese Funktion aufgerufen hat,

```

//verweist auf den Anfang der Liste.

`*mHndl=newPntr;`

`return;`

`}`

G.3 Rotieren von Multipolen in der vorgegebenen Datenstruktur

Das Multipolmoment, welches für die gesamte Rechnung und jeden Gitterplatz gilt, ist in *master* abgelegt. Mit den Eulerwinkeln in *winkel* wird diese Vorlage gedreht und das Ergebnis in *dHndl* gespeichert. Zum Rotieren wird die Funktion *wignerD* aus Anhang G.6 benötigt.

```
//das Quellmoment ist immer "master"
void copyRotateMultipol(MULTIPOLES **dHndl, VEC3D *winkel) {
    MULTIPOLES *sTmpPntr, *dTmpPntr;
    QL *fixedQl, *sTmpQl, *dTmpQl;
    int l, m, n;
    double _Complex qValue, wD;

    sTmpPntr=master;
    dTmpPntr=*dHndl;

    while(sTmpPntr!=NULL)//für alle Ordnungen L in source
    {
        l=sTmpPntr->l;
        dTmpQl=dTmpPntr->moments;
        fixedQl=sTmpPntr->moments;

        //für alle magnetischen Quantenzahlen n der Ordnung L
        while(dTmpQl!=NULL)
        {
            qValue=0;
            n=dTmpQl->m;
            sTmpQl=fixedQl;
            //für alle magnetischen Quantenzahlen m der Ordnung L
            while(sTmpQl!=NULL)
            {
                m=sTmpQl->m;
                wD=wignerD(l, m, n, winkel);
                wD*=(sTmpQl->qlm);
                qValue=(qValue+wD);
                //qValue ist der Überlapp von q1(l,n) mit allen q2(l,m)
```

```
    sTmpQ1=sTmpQ1->next;
  }
  dTmpQ1->qlm=qValue;
  //der Überlapp ist der Wert des gedrehten Tensors
  dTmpQ1=dTmpQ1->next;
}
sTmpPntr=sTmpPntr->next;
dTmpPntr=dTmpPntr->next;
//endet wenn next=NULL
}
return;
}
```

G.4 Paarwechselwirkungsenergie

Diese Funktion berechnet die Wechselwirkungsenergie zweier Multipole, *aHndl* und *bHndl*. Der Verbindungsvektor zwischen den Momenten wird als *rVec* übergeben. Die Energie ergibt sich gemäß Gl. 2.38. Interessant ist, wie die Wechselwirkung bei der vorgegebenen Datenstruktur berechnet wird.

```
double pairEnergy(MULTIPOLES **aHndl, MULTIPOLES **bHndl, VEC3D
*rVec)
{

    double energy=0;
    double _Complex eSum=0;
    MULTIPOLES *aTmpPntr,*bTmpPntr;
    QL *aTmpQ,*bTmpQ;
    int l1,l2,m1,m2;
    double _Complex aQ,bQ;
    double scale,rPow;
    double _Complex Y;

    aTmpPntr=*aHndl;

    xyz_To_RThetaPhi(rVec);
    //Transformiert den Abstandsvektor in Kugelkoordinaten

    while(aTmpPntr!=NULL) //für alle Ordnungen des ersten Moments
    {
        aTmpQ=aTmpPntr->moments;
        //für alle magnetischen Quantenzahlen des ersten Moments
        while(aTmpQ!=NULL)
        {
            l1=aTmpQ->l;
            m1=aTmpQ->m;
            aQ=conj(aTmpQ->qlm);

            bTmpPntr=*bHndl;
            while(bTmpPntr!=NULL) //für alle Ordnungen des zweiten Moments
            {
```

```
bTmpQ=bTmpPntr->moments;
//für alle magnetischen Quantenzahlen des zweiten Moments
while(bTmpQ!=NULL)
{
  l2=bTmpQ->l;
  m2=bTmpQ->m;
  bQ=conj(bTmpQ->qlm);
  scale=scaleFun(l1,l2,m1,m2); //berechne Normierungsfaktor
  rPow=pow(rVec->x,l1+l2+1);
  //berechne Energie, y und z sind theta und phi
  Y=yIm(l1+l2,-m1-m2, rVec->y,rVec->z);
  Y/=rPow;
  Y*=scale;
  eSum=(eSum+(Y*aQ*bQ));
  bTmpQ=bTmpQ->next;
  //schrittweise alle einen weiter setzen
}
bTmpPntr=bTmpPntr->next;
}
aTmpQ=aTmpQ->next;
}
aTmpPntr=aTmpPntr->next;
}
energy=creal(eSum);
return energy;
}
```

G.5 Berechnung der Gesamtenergie

Ändert in einer Monte Carlo-Rechnung ein Moment seine Lage, so müssen die Paarwechselwirkungsenergien mit allen anderen Momenten berechnet werden. Im Falle von Dipolen reicht es, das Feld am Ort aller Momente zu vermerken, die Feldänderung zu berechnen und daraus die Energieänderung abzuleiten. Dieses Vorgehen ist bei Momenten höherer Ordnung nicht möglich. Da höhere Momente mit höheren Ableitungen des Potentials wechselwirken, müßten alle Kombinationen der Ableitungen bis zur Ordnung der Momente vermerkt werden.

Die Paarwechselwirkungsenergien sind virtuell in einer unteren Dreiecksmatrix abgelegt (das Feld *energies*). Bei N Momenten hat das Feld *energies* $N \cdot (N - 1)/2$ Einträge. Hier steht jeweils die Wechselwirkung von Moment i mit Moment j . Die Funktion *calcEnergies* berechnet die Gesamtenergie, wenn sich das j -te Moment geändert hat. Um zu Beginn die Gesamtenergie festzulegen wird diese Funktion einmal für alle möglichen j aufgerufen, so daß alle möglichen Paarwechselwirkungen berechnet und gespeichert werden. Hierbei wird sowohl die Wechselwirkung von i mit j als auch umgekehrt berechnet. Der Mehraufwand ist jedoch vernachlässigbar klein, sofern es sich um Monte Carlo-Rechnungen handelt. Für die Anisotropierechnungen, bei denen ausschließlich, mehrfach die Gesamtenergie zu berechnen ist, wurde der Programm-Code modifiziert und die überflüssige Summation entfernt.

```
//geändert wurde j(in der Numerierung 1...N)
void calcEnergies(int j, double *energy)
{
    /*energy ist ein pointer auf locE (temporäre Energie) in monteCarlo
    int k;
    unsigned long int position,nuJ;
    double e=0;
    VEC3D *r1,*r2,deltaR;
    r1=&(coordinates[j-1][0]);
    //rotiere Moment j
    copyRotateMultipol(&mp1,&(coordinates[j-1][1]));

    //Wechselwirkung der Momente i mit i<j
    //in der unteren Dreiecksmatrix stehen diese in einer Zeile
    //die Länge der Zeile ist abhängig von j
    for(k=0;k<(j-1);k++)
    {
```

```

position= nu(cLength,k)+(unsigned long int)(j-k-2);
//die Position von (Zeile,Spalte) muß in die Position der
//eindimensionalen Liste energies umgerechnet werden
energiesTmp[k]=energies[position];
//merke die alte Energie
(*energy)-=energiesTmp[k];
//entferne aus der alten energie die alte Paarwechselwirkung;
//berechne / erzeuge den i-ten Multipol
//bestimme den Abstand zwischen i und j und berechne die Wechselwirkung
r2=&(coordinates[k][0]);
copyRotateMultipol(&mp2,&(coordinates[k][1]));
rDiff(r1, r2, &deltaR);
e=pairEnergy(&mp1, &mp2, &deltaR);
*energy+=e;
//addiere die neue Paarwechselwirkung
energies[position]=e;
//schreibe die neue Energie in die Paarwechselwirkungsliste.

}
nuJ=nu(cLength, j-1);
//Wechselwirkung der Momente i mit i>j (nie j-j, immer i!=j)
//in der unteren Dreiecksmatrix stehen diese in einer Spalte
//sonst wie oben
for(k=(j-1);k<(cLength-1);k++)
{
    position= nuJ+(unsigned long int)(k-j+1);

    energiesTmp[k]=energies[position];
    *energy-=energiesTmp[k];
    r2=&(coordinates[k+1][0]);
    copyRotateMultipol(&mp2,&(coordinates[k+1][1]));
    rDiff(r1, r2, &deltaR);
    e=pairEnergy(&mp1, &mp2, &deltaR);
    *energy+=e;
    energies[position]=e;
}
return;
}

```

```
#####  
//Umrechnung von (Zeile,Spalte) der unteren Dreiecksmatrix in die Position der  
//eindimensionalen Liste energies
```

```
unsigned long int nu(int n, int k)  
{  
    unsigned long int out;  
    out=(2*n-k-1);  
    out*=(unsigned long int)k;  
    out/=2;  
    return(out);  
}
```

G.6 Wigner-D-Funktion

Die Funktion *wignerD* dreht einen Tensor in Kugelkoordinaten um die Eulerwinkel α , β und γ , die im *struct winkel* übergeben werden. Die Drehungen um die z -Achse lassen sich als Exponentialfunktionen schreiben.

```
double _Complex wignerD(int l, int m, int n, VEC3D *winkel)
{
    double _Complex myOut=0;
    double mySum=0;
    int i;

    myOut.im-=(winkel->x*(double)m+winkel->z*(double)n);
    //damit ist es äquivalent zu (-I)*(...)
    myOut=cexp(myOut);

    for(i=0;i<=(l+n);i++) mySum+=wignerd(l,m,n,winkel->y,i);
    return(myOut*mySum);
}
```

Für die Drehung um die y -Achse wird die Funktion *wignerd* aufgerufen. Die Funktion erhält als Werte die Ordnung j des Tensors sowie die magnetischen Quantenzahlen m und n der Tensoren, deren Überlapp zu berechnen ist (s. Gl. 2.42). Das Ergebnis ist, bis auf die erwähnten Exponentialfunktionen, der Überlapp. Innerhalb der Funktion werden die Routinen *fac*, die einfache Fakultät und *sqrtfac*, die Quadratwurzel der Fakultät, aufgerufen.

```
double wignerd(int j, int m, int n, double beta, int k)
{
    long sig;
    double N[5];
    double D[5];
    long test, cpow, spow;
    double num_den=1;
    int i;

    sig = j + m + k;
    N[1] = sqrtfac((long)(j + n));
    N[2] = sqrtfac((long)(j - n));
```

```

N[3] = sqrtfac((long)(j + m));
N[4] = sqrtfac((long)(j - m));
D[1] = j + m - k;
D[2] = k;
D[3] = j + n - k;
D[4] = k - n - m;

if(
  (D[1] < 0.) || (D[2] < 0.) || (D[3] < 0.) || (D[4] < 0.)
) test=1;
else test=0;
//d1 testet ob kmax=min(j+m,j+n)*
//d2 testet ob k>=0 ist redundant*
//d3 testet ob k<=j+n ist redundant*
//d4 testet ob kmin=max(0,m+n)*
if(test==1) return(0);

D[1] = fac(D[1]);
D[2] = fac(D[2]);
D[3] = fac(D[3]);
D[4] = fac(D[4]);

for(i=1;i<5;i++) num_den *= (N[i]/D[i]);
spow = 2*j - 2*k + n + m;
cpow = 2*k - n - m;

if( (fabs(beta)<1.e-15)&&(spow==0)) if(n==m) return(1);
else return(0);
if( (fabs(beta-180.*DEGREE)<1.e-15)&&(cpow==0))
  if(n+m==0) return(pow(-1.,j+m)); else return(0);
// es ist zu berechnen: <jm'|exp(beta Jy)|jm>*
// wenn beta=0 dann ist <jm'|I|jm> = <jm'|jm> = delta(m,m')*
// wenn beta=180°, djmn(180°)=(-1)^(j+m)delta(m,-n)*
// dies ist zu testen, um 0^0 zu vermeiden! *)
// falls n != m arbeitet der Algorithmus dennoch.*
return (pow(-1,sig)*num_den*pow(cos(beta/2.),cpow)*pow(
sin(beta/2.),spow) );
}

```

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|------|---|----|
| 2.1 | Skizze zum magnetisierten Quader | 7 |
| 2.2 | Geometrie bei der Fourier-Entwicklung eines Punktdipols | 11 |
| 3.1 | x - z -Querschnitt durch das Streuvektorfeld eines quadratischen Teilchens | 21 |
| 3.2 | Charakteristischer Abstand für das Auftreten von Kanteneffekten bei einer quadratischen Struktur mit senkrechter Magnetisierung | 22 |
| 3.3 | Streufeld eines quadratischen Teilchens als Funktion der Strukturgröße . | 23 |
| 3.4 | Geometrie des Streifengitters | 24 |
| 3.5 | z -Komponente des Feldes über Streifen mit einer Magnetisierung in der Ebene | 25 |
| 3.6 | In der Ebene magnetisierte Streifen. Abhängigkeit der Feldmodulation von der Periode und der Höhe der Streifen | 26 |
| 3.7 | Streifen mit senkrechter Magnetisierung. z -Komponente der Magnetisierung als Funktion des Ortes sowie die Lage der globalen Feldextrema als Funktion des Abstandes z | 27 |
| 3.8 | Senkrecht magnetisierte Streifen. Feldmodulation ΔB_z als Funktion der Streifenbreite a für verschiedenen Abstände z vom Gitter | 28 |
| 3.9 | Skizzen von 2dim. Gittern: Rechteckgitter, Schachbrettmuster und hexagonale Anordnung. | 30 |
| 3.10 | z -Komponente des Magnetfeldes eines Quadratgitters mit quadratischen Teilchen. Magnetisierung in der Ebene | 31 |
| 3.11 | z -Komponente des Magnetfeldes eines Rechteckgitters mit rechteckigen Teilchen, berechnet entlang der y -Richtung. Magnetisierung in x -Richtung | 31 |
| 3.12 | Maximale Feldmodulation im Quadratgitter in x - und y -Richtung als Funktion der Teilchenhöhe h sowie als Funktion des Abstandes z | 32 |
| 3.13 | Lage und Größe der extremalen B_z -Komponente für diagonal magnetisierte Quadrate in einem zentrierten Gitter | 33 |

| | | |
|------|---|----|
| 3.14 | Optimale Strukturgröße diagonal in der Ebene magnetisierter Quadrate in einem zentrierten Gitter sowie ein Vergleich der Feldmodulation mit derjenigen von Quadraten mit Magnetisierung in x -Richtung im idealen Schachbrettmuster | 34 |
| 3.15 | Kontur-Graphik der B_z -Komponente für zentriert angeordnete und diagonal magnetisierte Teilchen mit optimierter und idealer Schachbrettfüllung | 35 |
| 3.16 | 3D-Graphiken der B_z -Komponente für quadratische Teilchen mit senkrechter Magnetisierung, angeordnet auf einem Quadrat- und einem Schachbrettgitter | 36 |
| 3.17 | Maximale Modulation der B_z -Komponente senkrecht magnetisierter Teilchen im einfachen und im zentrierten Quadratgitter als Funktion der Strukturgröße. | 37 |
| 3.18 | ΔB_z senkrecht magnetisierter, kreisförmiger Kobaltteilchen in einem dreizähligen Gitter als Funktion des Teilchenradius sowie eine dreidimensionale Graphik bei optimaler Strukturgröße | 38 |
| 3.19 | Kontur-Graphik der B_z -Komponente für kreisförmige Teilchen in hexagonaler Anordnung und der Magnetisierung in der Ebene | 39 |
| 3.20 | B_z -Komponente senkrecht magnetisierter Scheiben im Kagome- und im Honigwabengitter | 40 |
| 3.21 | ΔB_z senkrecht magnetisierter Scheiben in dreizähligen Gittern als Funktion des Abstandes | 42 |
| 4.1 | Skizze eines polarisierten Teilchens mit fünffacher Rotationssymmetrie. | 45 |
| 4.2 | Skizze zur Herleitung der Funktion $\delta_{0,\text{mod}(m,n)}$ | 46 |
| 4.3 | Äquipotentialfläche zum Dotriakontapolummoment eines Würfels | 47 |
| 4.4 | Multipolmomente einer senkrecht magnetisierten Kreisscheibe | 50 |
| 4.5 | Wechselwirkungsenergie der Multipolmomente zweier Teilchen mit quadratischer Grundfläche | 53 |
| 4.6 | Vergleich der exakten und der Multipolwechselwirkung zweier Teilchen mit quadratischer Grundfläche | 54 |
| 5.1 | Skizze zur quasi antiferromagnetischen Ordnung dipolar gekoppelter Teilchen auf einem zweidimensionalen Quadratgitter | 57 |
| 5.2 | Die quasi antiferromagnetische Ordnung von Dipolen auf einem Quadratgitter | 58 |
| 5.3 | Monte Carlo-Simulation der Ordnung von Quadrupolen auf einem Quadratgitter | 60 |

| | | |
|------|--|-----|
| 5.4 | Monte Carlo-Simulation der Ordnung von Quadrupolen auf einem Dreieckgitter | 61 |
| 5.5 | Vergleich des analytisch berechneten idealen Winkels der „Windradkonfiguration“ von Quadrupolen auf einem Dreieckgitter mit der Winkelstatistik aus der Monte Carlo-Simulation | 62 |
| 5.6 | Skizze zweier Domänen von Quadrupolen auf dem Dreieckgitter. Es bildet sich eine stabile Domänenwand | 63 |
| 5.7 | Monte Carlo-Simulation von Quadrupolen (Q_{20}) im XY-Modell auf einem Dreieckgitter | 64 |
| 5.8 | Photographien zweier Modelle mit wechselwirkenden Kompaßnadeln | 65 |
| 5.9 | Monte Carlo-Simulation von Oktopolen: Dreieck und Quadratgitter | 66 |
| 5.10 | Monte Carlo-Simulation von Hexadekapolen auf einem Quadrat- und einem Dreieckgitter | 67 |
| 6.1 | Nichtperiodische Parkettierungen | 73 |
| 6.2 | Winkelabhängige Gesamtenergie von parallelen Hexadekapolen auf einem Quadratgitter | 74 |
| 6.3 | Lokale Energieverteilung von Hexadekapolen auf einem Penrose-Gitter | 75 |
| 6.4 | Winkelabhängige Energie von Hexadekapolen, angeordnet auf einem Penrose-Gitter | 76 |
| 6.5 | Winkelabhängige Energieschwankung von Hexadekapolen, angeordnet auf einem Penrose-Gitter, als Funktion der Stichprobengröße | 77 |
| 7.1 | Skizze eines statischen Ellipsometers | 85 |
| 7.2 | Feldgeometrie zum Suszeptibilitätsexperiment | 86 |
| 7.3 | Simuliertes Experiment zur Suszeptibilität | 89 |
| 7.4 | Kerr-Messung an Co/Cu(1 1 13) | 94 |
| 7.5 | Simulation einer Kerr-Messung mit einer Mischung von Rotation und Elliptizität | 95 |
| 7.6 | Stark verzerrte Kerr-Messung an Fe/Si | 96 |
| 7.7 | Simulation von Kerr-Messungen in gespiegelter Geometrie | 97 |
| 7.8 | Kerr-Messungen an einer Fe/Si Probe. Rotation und Elliptizität mit positivem und negativem Einfallswinkel. Symmetrische und antisymmetrische Komponenten | 98 |
| 7.9 | Vergleich von angepaßter und gemessener Hysteresekurve | 100 |
| 7.10 | Vergleich von angepaßter und linear berechneter Elliptizität | 101 |
| 7.11 | Zusätzliche z -Komponenten der Magnetisierung während des Ummagnetisierens | 102 |

| | | |
|-----|--|------|
| D.1 | 3D Skizze zum Konzept der mechanischen Austauschwechselwirkung . | VIII |
| D.2 | 2D Skizze zum Konzept der mechanischen Austauschwechselwirkung . | VIII |
| D.3 | Skizze zum funktionstüchtigen mechanischen Austausch | X |
| G.1 | Strukturdiagramm des C-Programms | XVI |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|-----|---|----|
| 4.1 | Multipolmomente eines Teilchens mit vierzähliger Symmetrie als Funktion der Höhe | 48 |
| 4.2 | Multipolmomente Q_{lm} eines Teilchens mit zylindrischer Symmetrie und senkrechter Magnetisierung | 49 |
| 4.3 | Multipolmomente Q_{lm} eines Teilchens mit zylindrischer Symmetrie und Magnetisierung in der Ebene | 51 |
| 4.4 | Multipolmomente Q_{lm} eines zweidomänigen Teilchens mit zylindrischer Symmetrie und Magnetisierung in der Ebene | 52 |
| 4.5 | Wechselwirkungsenergie der Multipolmomente zweier Teilchen mit vierzähliger Rotationssymmetrie. | 53 |
| 5.1 | Axiale Multipole | 70 |
| 6.1 | Anisotropie axialer Multipole Q_{l0} der Ordnung $l = 1$ bis $l = 5$ auf Gittern mit $s = 1$ bis $s = 5$ äquivalenten Spiegelachsen | 79 |

Publikationen und Konferenzbeiträge

- N. Mikuszeit, S. Pütter, and H. P. Oepen *Thickness dependent magnetization canting in Co on Cu(1 1 13)*, J. Magn. Magn. Mater. **268** (2004) 340
- N. Mikuszeit, S. Pütter, and H. P. Oepen *Die uniaxiale Anisotropie ultradünner Co Filme auf vizinalem Cu(001)*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Hamburg, 29.03.2001
- S. Pütter, H. F. Ding, N. Mikuszeit and H. P. Oepen *Investigation of magnetic ultrathin films by the magneto-optic Kerr effect*, Workshop Trofaiach, 9.-13.06.2002
- S. Pütter, N. Mikuszeit und H. P. Oepen *Magnetic anisotropies in Co/Cu(1 1 13)*, Workshop Trofaiach, 9.-13.06.2002
- N. Mikuszeit, S. Pütter und H. P. Oepen *Verspannungen und magnetische Eigenschaften in Co auf vizinalem Cu(001)*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg, 24.02.2004
- N. Mikuszeit, E. Y. Vedmedenko und H. P. Oepen *Multipolare Anisotropie magneto-statisch gekoppelter periodischer Nanostrukturen*, Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, Regensburg, 26.02.2004

Eingereichte Publikationen

- N. Mikuszeit, E. Y. Vedmedenko, and H. P. Oepen *Multipole Interaction of Polarized Single-Domain Particles*, J. Phys. C, (submitted 2004)
- E. Y. Vedmedenko, N. Mikuszeit, R. Wiesendanger, and H. P. Oepen *Ground-states of Magnetostatically Coupled Arrays: the Influence of High Order Multipolar Corrections*, J. Phys. C, (submitted 2004)

Danke

Bedanken möchte ich mich bei

- Herrn Prof. Dr. H. P. Oepen für die Möglichkeit diese Arbeit anzufertigen sowie für das Vertrauen in meine Fähigkeiten und Kreativität.
- Herrn Prof. Dr. J. Kötzler für das Zweitgutachten zu dieser Arbeit.
- Herrn Dr. R. Frömter für eine gute Zusammenarbeit, unvorstellbar viele, fruchtbare Diskussionen sowie für die Hilfe bei der Korrektur der Dissertation.
- Frau Dr. E. Vedmedenko, ebenfalls für viele fruchtbare Diskussionen und Anregungen. Ohne ihre Hilfe und Unterstützung wären viele Ideen nie verwirklicht worden. Für ihre zusätzlichen Monte Carlo-Rechnungen, die einen besseren Überblick über die Vielseitigkeit der Thematik ermöglichten, bin ich dankbar.
- Frau Dr. S. Pütter für die Unterstützung am Kerr Experiment. Die zahlreichen Diskussionen konnten mein physikalisches Verständnis vertiefen. Ihre Hilfsbereitschaft beim Setzen dieser Arbeit ist nicht zu ersetzen.
- dem Rest der Arbeitsgruppe Grenzflächenphysik, für ein großartiges Arbeitsklima und viele nette Abende.
- meinem Bruder Alexej Mikuszeit, der mich jederzeit weit über das hinaus, was man erhoffen kann, unterstützt hat.
- meiner Mutter, die mich stets in meinen Zielsetzungen bestärkte.
- Frau Kerstin Tietz für ihre Orthographiekenntnisse.
- meinen Freunden, die mich motiviert haben (vielleicht ohne es zu wissen), Kai Kossow, Matthias Wiggers, Tim Steinert, Judith Schemmel, Jens Holzheuer und Oliver Tietgen.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Promotionsarbeit selbständig und ohne fremde Hilfe verfaßt habe. Andere als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel sind nicht verwendet worden. Den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommene Stellen sind als solche kenntlich gemacht.

Hamburg, im Juli 2004

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name Nikolai Mikuszeit
Geboren am 14. 07. 1974
in Kellinghusen (Kreis Steinburg, Schleswig-Holstein)
Familienstand ledig

Schulbildung

1981-1985 Grundschule Hohenlockstedt
1985-1988 Auguste Viktoria Schule zu Itzehoe
1988-1994 Gymnasium Osdorf (Hamburg)
1994 Hochschulreife

Studium

1994-1996 Grundstudium an der Universität Hamburg
1996 Vordiplom
1996-2001 Hauptstudium an der Universität Hamburg
30.03.2001 Diplom in Physik
Titel der Diplomarbeit:
Magnetische Anisotropien ultradünner Kobaltfilme auf Kupfer (1 1 13)

Anstellungen

2001-2004 wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität Hamburg

Hamburg, im Juli 2004