

Computersimulationen zur Dynamik und Thermodynamik von Domänenwänden in nanostrukturierten Ferromagneten

Vom Fachbereich Physik
der Universität Duisburg-Essen
(Campus Duisburg)
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Dissertation von

Robert Wieser

aus
Leipzig

Referent: Priv. Doz. Dr. U. Nowak
Korreferent: Prof. Dr. P. Entel
Tag der mündlichen Prüfung: 28. April 2006



Kurzfassung

Die Untersuchung magnetischer Nanostrukturen ist ein hochaktuelles Forschungsgebiet der letzten Jahre. Durch die Möglichkeit ihrer kontrollierten Herstellung und Untersuchung spielen diese Strukturen eine wichtige Rolle für die Grundlagenwissenschaften genauso wie für die Anwendung im Bereich der Informationstechnologie.

Bisherige theoretische Untersuchungen bezogen sich bislang in erster Linie auf die Beschreibung von Domänenkonfiguration und deren Dynamik in magnetischen Nanostrukturen. Der Einfluß der Temperatur wurde dabei kaum untersucht. In dieser Dissertation wird anhand der Untersuchung von Domänenwandstrukturen gezeigt, daß der Einfluß der Temperatur zu neuen interessanten Effekten führen kann, wie etwa dem Auftreten neuer Domänenwandformen oder dem superparamagnetischen Verhalten eines *Vortexcores*.

Solche Untersuchungen sind erst in den letzten Jahren unter Verwendung neuer numerischer Verfahren möglich geworden. Zu diesen Verfahren zählen die numerische Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung mit Langevin-Dynamik, Monte Carlo Simulation mit quantifiziertem Zeitschritt, die Implementierung der Fast-Fourier-Transformations-Methode zur Berechnung der langreichweitigen Dipol-Dipol Wechselwirkung, die lokale Molekularfeldnäherung und die Methode der Greenfunktionen. Alle diese Verfahren sind im Rahmen dieser Dissertation verwendet worden, um die Dynamik sowie Thermodynamik von Domänenwandstrukturen zu untersuchen.

Im Fall der Dynamik zeigt sich, daß alle drei aus der Literatur bekannten Gleichungen für die Geschwindigkeit einer Domänenwand (die Gleichungen nach Walker, nach Slonczewski und nach Landau und Lifshitz) in bestimmten Grenzfällen Relevanz besitzen können. Insbesondere zeigt es sich aber im Grenzfall verschwindender Dämpfungen, daß auch hier eine Domänenwandbewegung noch möglich ist, welche durch das Auftreten von Spinwellen begleitet wird.

Betrachtet man die Thermodynamik, so läßt sich zeigen, daß die Magnetisierung in transversalen Domänenwänden bei einer kritischen Temperatur unterhalb der Curietemperatur T_C verschwindet, während die Magnetisierung innerhalb der Domänen erst bei T_C Null ist. Gleiches gilt auch für andere Domänenwandstrukturen, wie etwa der *Vortexstruktur*. In diesem Fall ist die Magnetisierung des *Vortexcores* bereits unterhalb der Curietemperatur Null.

Neben diesen thermodynamischen Effekt tritt zusätzlich noch ein dynamischer Effekt auf, das superparamagnetische Verhalten des *Vortexcores*. Dieser Effekt entspricht dem superparamagnetischem Verhalten von Nanopartikeln. *FePt* Nanopartikel werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit ebenfalls untersucht. Unter Verwendung von Ab-Initio-Rechnungen, die im Rahmen einer Kooperation mit der Fa. Seagate Research in Pittsburgh, PA, durchgeführt wurden, wurden die Parameter eines effektiven Spinmodells für *FePt* inklusive einer langreichweitigen anisotropen Austauschwechselwirkung hergeleitet. Rechnungen zur thermisch aktivierten Magnetisierungsdynamik von *FePt* Nanopartikeln im Vergleich mit dem Néel-Brown-Gesetz

zeigen die Grenze der Zulänglichkeit von Makrospinmodellen auf und unterstreichen die Wichtigkeit von atomistischen Simulation.

Summary

The observation of magnetic nanostructures is a highly topical field of research in recent years. Due to new developments regarding their controlled fabrication and characterization these structures play an important role for basic research as well as for applications in the area of information technology.

The focus of prior theoretical observations was mainly on the description of domain structures and domain dynamics within such nanostructures. Effects of a finite temperature were here usually neglected. Within this dissertation the influence of the temperature will be investigated for the case of domain walls. It will be shown, that a finite temperature leads to novel and interesting effects, like new domain wall shapes or the super-paramagnetic behaviour of a vortex core.

It was not before recently that these kinds of theoretical investigations were made possible with the development of new numerical techniques. These are, e. g., the numerical solution of the Landau-Lifshitz-Gilbert equation with Langevin dynamics, the heat bath Monte Carlo simulation with quantified time step, the implementation of the fast Fourier transformation method to implement long-range dipolar interactions, the local mean field method, and Green's function methods. In this work, all the above methods will be used to describe the dynamics and thermodynamics of domain wall structures.

For the case of domain walls dynamics it will be shown that all of the three equations for domain wall velocities which can be found in the literature (the equations after Walker, after Slonczewski and after Landau and Lifshitz) can be relevant in certain limits. Surprisingly, it is shown that for the case of vanishing damping a domain wall can still move, at the same time emitting spin waves.

Considering thermodynamics it will be shown that the magnetization component inside a transverse domain wall disappears at a temperature below the Curie temperature T_C where the magnetization component inside the domains disappears. The same effect can be observed in other domain wall structures, like, e. g. a vortex structure. In this case the magnetization inside the vortex core disappears below T_C .

Besides this thermodynamic effect a dynamical effect exists: the vortex core shows a super-paramagnetic behaviour similar to that found in nanoparticle. The investigation of *FePt* nanoparticles is also part of this dissertation. Within a collaboration with Seagate Research in Pittsburgh, PA, *ab-initio* calculations have been performed in order to derive and parameterize an effective spin model including an anisotropic long-range exchange interaction. The comparison of the simulation results for the thermally activated magnetization dynamics of *FePt* nanoparticles with the Néel-Brown model illustrates the limits of macro-spin models and underlines the importance of atomistic calculations.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
Summary	iii
Inhaltsverzeichnis	v
Abbildungsverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
2 Das Heisenberg Modell	5
2.1 Verallgemeinerung und Erweiterung des Heisenberg Modells	6
2.2 Verbindung zum Mikromagnetismus	7
3 Die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung	10
3.1 Herleitung der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung	10
3.2 Verwandte Bewegungsgleichungen	14
4 Die Gleichgewichtsthermodynamik des Heisenberg Modells	18
4.1 Thermische Mittelung und Molekularfeldnäherung	18
4.2 Die stochastische Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung	19
4.3 Vergleich der Thermodynamik des klass. mit dem qm. Heisenberg Modell	21
5 Numerische Verfahren	25
5.1 Numerische Integration der stochastischen Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung	25
5.2 Der heat bath Monte Carlo Algorithmus mit quantifiziertem Zeitschritt	26
5.3 Die lokale Molekularfeldnäherung	28
5.4 Die Methode der Greenfunktionen mit RPA-Entkopplung	29
6 Domänenwände in Nanodrähten	35
6.1 Domänenwände: Wandform und Energie	36
6.2 Domänenwände in Nanodrähten	40
6.3 Domänenwanddynamik: theoretische Betrachtung	46
6.3.1 Die Walker Gleichung	49

6.3.2	Die Slonczewski Gleichung	52
6.4	Domänenwanddynamik: Computersimulation	54
6.4.1	Domänenwanddynamik im XYZ-Modell	64
6.5	Von Spinwellen und Domänenwänden	66
6.5.1	Spinwellen in und an statischen Domänenwänden	67
6.5.2	Domänenwanddynamik und Spinwellen	70
7	Thermisch aktivierte Domänenwände	79
7.1	Einfluß der Temperatur auf Domänenwände	79
7.1.1	Transversale Domänenwand	79
7.1.2	Vortexdomänenwand	86
7.1.3	Temperaturabhängigkeit der Domänenwandgeschwindigkeit	87
8	Thermisch aktivierte Vortexstrukturen	90
8.1	Gleichgewicht: lokale Molekularfeldnäherung	92
8.2	Dynamik: Superparamagnetisches Verhalten	95
9	FePt Nanopartikel	99
9.1	Die effektive FePt Heisenberg Hamiltonfunktion	100
9.2	Das Néel-Brown Modell	103
9.3	Charakterisierung der FePt Nanopartikel	105
9.4	Überprüfung der Brown'schen Theorie	108
9.5	Anwendung der lokalen Molekularfeldnäherung auf FePt Nanopartikel	110
9.6	Anwendung der RPA Greenfunktionsrechnung auf FePt Bulksysteme	112
10	Zusammenfassung	116
A	Anhang	118
A.1	Fast Fourier Transformation	118
A.2	Berechnung der Rotation auf einem 2 dim. Gitter	119
A.3	Die Gauß Quadratur	120
A.3.1	3D Gauß Quadratur mit "festen" Integrationsgrenzen	121
A.3.2	3D Gauß Quadratur ohne "feste" Integrationsgrenzen	122
	Literaturverzeichnis	123
	Eigene Veröffentlichungen	133

Abbildungsverzeichnis

3.1	Relaxation $-\mathbf{S} \times (\mathbf{S} \times \mathbf{H})$ und Präzession $\mathbf{S} \times \mathbf{H}$ eines magnetischen Momentes \mathbf{S} in einem internen Feld $\mathbf{H}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i}$	12
4.1	Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im Falle des klassischen isotropen Heisenberg Modells.	21
4.2	Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im Fall des quantenmechanischen Heisenberg Modells mit Spinquantenzahl $S = \frac{1}{2}$	22
4.3	<i>finite size scaling</i> Plot des klassischen Heisenberg Modells gerechnet mit dem <i>heat bath</i> Monte Carlo Verfahren.	23
5.1	Magnetisierung $\langle \hat{S}^z \rangle$ und Korrelationsfunktion $\langle (\hat{S}^z)^2 \rangle$ eines 2D Films mit $J = 100$ und unterschiedliche Anisotropien D/J	33
6.1	Bloch- / Néel-Wand	35
6.2	Wandenergie E_Δ als Funktion der Anisotropie D einer transversalen Domänenwand.	39
6.3	Abweichung der numerischen Lösung von der Kontinuumslösung (Mikromagnetismus) für große Anisotropien.	39
6.4	Transversale Domänenwand und Vortexdomänenwand	40
6.5	Dipolwechselwirkungsenergie E_ω und Austauschwechselwirkungsenergie E_J zweier magnetischer Momente in Abhängigkeit ihrer relativen Orientierung zueinander.	41
6.6	Domänenwandbreite Δ als Funktion des Verhältnisses $\frac{\omega}{J}$	43
6.7	Domänenwandenergiedichte σ_Δ , der transversalen bzw. Vortexdomänenwand, als Funktion von $\frac{\omega}{J}$	44
6.8	Zirkulation $Z_{\max}(x = 0)$ als Funktion der dipolaren Wechselwirkungsstärke ω	45
6.9	Überprüfung der Relation für die Formanisotropie.	45
6.10	Mögliche Ummagnetisierungswege eines magnetischen Momentes	53
6.11	Abhängigkeit der Geschwindigkeit v von der magnetischen Induktion (äußeres Feld).	55
6.12	Beweglichkeit $\frac{dv}{dB}$ als Funktion der Drahtdicke d	56
6.13	Geschwindigkeit v als Funktion der Dipolwechselwirkungsstärke ω/J	57
6.14	Momentaufnahmen der Domänenwandbewegung einer transversalen Domänenwand	59

6.15	Momentaufnahmen der Domänenwandbewegung einer Vortexdomänenwand	60
6.16	Ummagnetisierung der magnetischen Momente in einer transversalen Domänenwand mit einer Anisotropieachse.	61
6.17	Projektion des Ummagnetisierungsweges eines magnetischen Momentes der Vortexdomänenwand.	62
6.18	Domänenwandmobilität der transversalen bzw. der Vortexdomänenwand als Funktion der Gilbertdämpfung α	63
6.19	Domänenwandmobilität als Funktion der Gilbertdämpfung α im Fall des XYZ-Modells.	65
6.20	Oszillatorische Domänenwandbewegung im Fall der transversalen Domänenwand in einem biaxialen ferromagnetischen Nanodraht.	72
6.21	Vortexdomänenwand: Wandbewegung im Grenzfall verschwindender Dämpfung $\alpha = 0$	73
6.22	Drahtquerschnitt während der Domänenwandbewegung der Vortexdomänenwand im Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$	74
6.23	Windungszahl und Querschnittsmagnetisierung als Funktion der Zeit.	74
6.24	Domänenwandbewegung einer transversalen Domänenwand mit ferromagnetischer Kopplung im Grenzfall verschwindender Gilbertdämpfung $\alpha \rightarrow 0$. 76	
6.25	Domänenwandbewegung einer transversalen Domänenwand mit antiferromagnetischer Kopplung im Grenzfall verschwindender Gilbertdämpfung $\alpha \rightarrow 0$	77
6.26	Fourieranalyse der Spinwellen (S_x -Komponente) für zwei verschiedene Magnetfeldstärken.	78
6.27	Mobilität vs. Gilbertdämpfung α für verschiedene Magnetfeldstärken im Fall des XYZ-Modells mit antiferromagnetischer Kopplung.	78
7.1	Temperaturabhängigkeit der leichten bzw harten Achsenrichtungsmagnetisierung einer transversalen Domänenwand.	80
7.2	Abhängigkeit der kritischen Temperaturen T_c und T^* von der Anisotropie.	81
7.3	Abhängigkeit der kritischen Temperatur T^* von der Stärke der Konstriktion.	82
7.4	<i>finite size scaling</i> Analyse zur Bestimmung des kritischen Verhaltens zusammengepresster Domänenwände.	84
7.5	Domänenwandformen einer transversalen Domänenwand	85
7.6	Elliptische Domänenwand	85
7.7	Lineare Domänenwand	86
7.8	Magnetisierung als Funktion des Ortes.	87
7.9	Temperaturabhängigkeit der Domänenwandgeschwindigkeit.	88
8.1	Zylindrische Wirbelstruktur	90
8.2	Schnitt durch die zylindrische Wirbelstruktur mit <i>Vortexcore</i>	91
8.3	Magnetisierung als Funktion der Temperatur einer zylindrischen <i>Vortexstruktur</i>	93

8.4	Magnetisierung des <i>Vortexcores</i> als Funktion der Temperatur.	94
8.5	Superparamagnetisches Verhalten des <i>Vortexcores</i>	96
8.6	Zeit bis zum ersten Ummagnetisierungsereignis als Funktion der inversen Temperatur.	97
9.1	Schematische Darstellung des <i>FePt</i> Kristalls in der L_{10} Phase.	100
9.2	Ortsdarstellung der langreichweitigen Austauschwechselwirkung.	102
9.3	Energiesketch Néel-Brown-Modell.	104
9.4	Momentenaufnahmen der Hysterese eines <i>FePt</i> Partikels.	105
9.5	Ummagnetisierungszeit als Funktion der Gilbertdämpfung α	106
9.6	<i>FePt</i> : Magnetisierung als Funktion der Temperatur.	107
9.7	Temperaturabhängigkeit der Anisotropie.	107
9.8	Überprüfung des Néel-Brown Gesetzes.	109
9.9	Überprüfung des thermischen Néel-Brown Gesetzes.	109
9.10	Temperaturabhängigkeit der Koerzitivfeldstärke.	110
9.11	<i>FePt</i> -MF: Magnetisierung über der Temperatur.	111
9.12	Das in den Simulationen verwendete kubische Gitter.	113
9.13	RPA-Sketch	114
9.14	Reduzierte Magnetisierung $M(T)/M(0)$ als Funktion der Temperatur für <i>FePt</i>	115
9.15	Curietemperatur T_c von <i>FePt</i> als Funktion der Spinquantenzahl S	115

1 Einleitung

Die Untersuchung magnetischer Nanostrukturen ist ein hochaktuelles Forschungsgebiet der letzten Jahre. Diese Strukturen ermöglichen es zum einen grundlegende magnetische Phänomene besser zu verstehen, zum anderen könnten sie auch im Hinblick auf mögliche Anwendungen in der Informationstechnologie interessant werden und in Zukunft die Grundlage neuer Technologien in der Datenspeicherung bilden. Von besonderem Interesse sind dabei Domänenwände, da im allgemeinen ferromagnetische Materialien nicht eindomänig sind, sondern magnetische Domänen ausbilden, welche durch Domänenwände getrennt sind. Mit Hilfe von Domänenwänden und geeigneten Nanostrukturierungen lassen sich z.B. logische Bauelemente konstruieren [1].

Domänenwände und deren Dynamik spielen ebenfalls eine Rolle beim Schalten von *giant magneto resistance* (GMR)- und *tunneling magneto resistance* (TMR)-Elementen bzw. beim Ummagnetisieren von zylindrischen Nanostrukturen zur Datenspeicherung [2–4]. Hierbei geht es darum, die GMR- / TMR-Elemente bzw. die Nanozylinder möglichst schnell zu schalten bzw. umzumagnetisieren, also eine möglichst große Domänenwandgeschwindigkeit zu erhalten. Weiterhin wäre auch ein Schalten mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten denkbar um z.B. Schaltprozesse zu synchronisieren.

Domänenwände spielen nicht zuletzt auch bei Widerstandsmessungen eine Rolle. So führt das Auftreten von Domänenwänden zu einer Erhöhung des Widerstandes (Domänenwandwiderstand). Um dies zu kontrollieren wird nach geeigneten Strukturen und Schichtsystemen gesucht, in denen man die Domänenwand möglichst gut kontrollieren kann. So werden z.B. durch geeignete Strukturierungen Domänenwände festgehalten [5–7].

Neben den Domänenwänden sind die sogenannten Vortexstrukturen (engl. *vortex* = Wirbel) in den Blickpunkt des Interesses geraten. Solche Vortexstrukturen treten z.B. in flachen zylindrischen Strukturen auf. Mit der Ausbildung des Wirbels ist im allg. das Auftreten eines Bereiches in der Mitte des Wirbels, in dem die Magnetisierung senkrecht zur Zylinderebene orientiert ist, verbunden. Dieser Bereich wird *Vortexcore* oder kurz *Core* genannt. Computersimulationen haben nun gezeigt daß es möglich ist, sowohl den *Core* als auch den Drehsinn des Wirbels unabhängig voneinander zu schalten [8]. Damit wäre es theoretisch denkbar, solche Vortexstrukturen zur Datenspeicherung zu verwenden, wobei sich zwei Bit (*Core*, Drehsinn) in einer Vortexstruktur speichern ließen.

Ein weiteres hochaktuelles Forschungsgebiet stellen die Nanopartikel dar. Na-

nopartikel bieten eine Reihe von Anwendungsmöglichkeiten: so lassen sich evt. selbstorganisierte magnetische Nanopartikel zur Konstruktion von Speichermedien verwenden [9, 10]. Diese Speichermedien hätten den Vorteil, daß man die Strukturierung nicht selbst vornehmen müßte und eine höhere Speicherdichte erreicht würde. Nanopartikel finden weiterhin Anwendungen in der Medizin als Träger für Medikamente. Die Idee hierbei ist die Kontrolle der Nanopartikel durch äußere Felder und somit eine gezielte Platzierung der Medikamente. Mit dem gleichen Verfahren ließen sich Nanopartikel zur gezielten Vernichtung von Tumoren verwenden.

Nun ergibt sich aber durch die Miniaturisierung bzw. durch Verwendung geeigneter Schichtstrukturen, in welchen im allgemeinen auch Domänenwände enthalten sein werden, eine Reihe von neuen Effekten, welche es zu verstehen gilt. Computersimulationen stellen hierbei eine sehr gute Möglichkeit dar, experimentelle Untersuchungen zu begleiten und zu ergänzen. Computersimulationen liefern hierbei Einblicke, die durch Experimente nicht gewonnen werden können. Weiterhin hat man die Möglichkeit, gezielt Wechselwirkungen und äußere Einflüsse ein- bzw. auszuschalten um deren Einfluß zu untersuchen.

Es existieren im wesentlichen zwei Arten von Simulationen und numerischen Rechnungen von magnetischen Systemen. Der Unterschied besteht darin, daß in dem einen Fall die Temperatur explizit in die Untersuchung eingeht und in dem anderen Fall nicht. Bei den Untersuchungen mit Temperatur handelt es sich meist um Rechnungen der Gleichgewichtsthermodynamik von statischen Strukturen. Die anderen Simulationen untersuchen die Magnetisierungsdynamik. Bei diesen Simulationen wird die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung, eine vektorielle nichtlineare Differentialgleichung erster Ordnung, gelöst. Mittlerweile gibt es hierzu eine Reihe kommerzieller bzw. nichtkommerzieller Programmpakete. Das bekannteste ist dabei der *Object Oriented MicroMagnetic Framework (OOMMF)* Code von NIST [11]. Allerdings berücksichtigen diese Programme nicht den Einfluß der Temperatur, oder aber sie liefern falsche Ergebnisse.

Im Rahmen dieser Arbeit wird der Einfluß der Temperatur auf Domänenwandstrukturen untersucht. Dazu werden verschiedene Methoden verwendet, welche sich sowohl der ersten bzw. der zweiten Gruppe von numerischen Untersuchungen zuordnen ließen. So wird neben der Untersuchung der Gleichgewichtsthermodynamik auch die Dynamik von Domänenwänden untersucht, wobei wahlweise der Einfluß der Temperatur mitbetrachtet werden kann. Die Ergebnisse der unterschiedlichen Methoden werden diskutiert und miteinander verglichen. Die Arbeit gliedert sich in vier Teile.

Im ersten Teil (Kap. 2 bis 5) werden die dieser Arbeit zugrunde gelegte Theorien und numerischen Verfahren diskutiert. In Kapitel 2 wird das in dieser Arbeit betrachtete klassische Heisenberg Modell eingeführt und auf die Verbindung zum Mikromagnetismus eingegangen, welcher die Grundlage der meisten Rechnungen der Magnetisierungsdynamik darstellt. In Kapitel 3 wird mit der Landau-Lifshitz-

Gilbert Gleichung die klassische Bewegungsgleichung des Heisenberg Modells eingeführt und diskutiert. Kapitel 4 behandelt die Gleichgewichtsthermodynamik des Heisenberg Modells und die Dynamik bei endlichen Temperaturen. Kapitel 5 gibt abschließend einen Überblick über die verwendeten numerischen Verfahren, welche in den vorhergehenden Kapitel z.T. bereits diskutiert wurden.

Der zweite Abschnitt (Kap. 6 und 7) behandelt Domänenwände in Nanodrähten. Zunächst werden die auftretenden Wandformen betrachtet und deren Dynamik (ohne Temperatur) diskutiert. Es wird insbesondere gezeigt, daß unterschiedliche Ummagnetisierungsmechanismen auftreten können, welche zu unterschiedlichen Domänenwandgeschwindigkeiten führen. Weiterhin zeigt sich, daß die drei unterschiedlichen Geschwindigkeitsgleichungen, welche sich in der Literatur finden lassen, alle ihre Gültigkeit besitzen. Den Abschluß der Untersuchung der Dynamik der Domänenwände bildet die Betrachtung des experimentell relevanten Grenzfalles kleiner Dämpfungen. In diesem Grenzfall kommt es zur Emission von Spinwellen, was zu interessanten Ergebnissen führt. So kann z.B. gezeigt werden, daß es im Grenzfall verschwindender Dämpfung zu einer Domänenwandbewegung mit endlicher Domänenwandgeschwindigkeit kommen kann, was auf den ersten Blick nicht möglich erscheint, da es in diesem Grenzfall nur zu einer Präzessionsbewegung der magnetischen Momente kommen sollte und zu keiner Relaxation.

Daran anschließend wird in Kapitel 7 die Thermodynamik der Domänenwände betrachtet, wobei ein besonderes Augenmerk auf den Vergleich der Ergebnisse einer Molekularfeldnäherung [12] mit Monte Carlo Simulationsrechnungen gelegt wird. Es zeigt sich hierbei, daß die Molekularfeldnäherung qualitativ richtige Ergebnisse liefert, allerdings die auftretenden Effekte unterschätzt. Die Monte Carlo Simulation hingegen ist relativ schwierig durchzuführen, liefert aber weitere Erkenntnisse, so daß die Molekularfeldnäherung und Monte Carlo Simulation sich einander ergänzen. Am Ende dieses Abschnitts wird auf die Dynamik der Domänenwände bei endlichen Temperaturen eingegangen, wobei sich hier die Grenzen der verwendeten Langevin-Dynamik aufzeigen.

In dem darauf folgenden dritten Teil (Kap. 8) wird die Diskussion über die Thermodynamik von Domänenwänden auf Vortexstrukturen übertragen. Dies wird bereits in Kapitel 7 anhand der Vortexdomänenwand motiviert. Auch in diesem Kapitel werden zwei numerische Verfahren angewendet, die lokale Molekularfeld-Rechnungen und die Langevin-Dynamik-Simulationen. Bei den Vortexstrukturen werden im wesentlichen zwei Phänomene beobachtet: Zum einen ein thermodynamisch bedingtes Verschwinden des *Vortexcores* und zum anderen ein superparamagnetisches Verhalten des Selbigen. Bei den auftretenden Phänomenen handelt es sich um ein thermodynamisches bzw. dynamisches Phänomen, was den Einsatz unterschiedlicher numerischer Verfahren zur Beschreibung notwendig macht.

Im vierten Teil (Kap. 9) wird das superparamagnetische Verhalten von *FePt*-Nanopartikel betrachtet. Hierbei werden erstmals alle relevanten Materialparameter

aus *Ab-Initio*-Rechnungen entnommen und langreichweitige Austauschwechselwirkungen berücksichtigt. Überprüft wird dabei das Néel-Brown-Gesetz, welches sich aber als unzureichend darstellt und durch ein thermisches Néel-Brown-Gesetz ersetzt werden muß. Die Ergebnisse in diesem Kapitel sind aus einer Kooperation mit der Theorieabteilung des Festplattenherstellers *Seagate Research* entstanden, der dieses Projekt auch finanziell gefördert hat.

Am Ende der Arbeit folgt eine Zusammenfassung und ein Anhang.

2 Das Heisenberg Modell

Eine große Klasse fester Körper weist in einem weiten Tieftemperaturbereich eine magnetische Fernordnung auf, welche unabhängig von dem Vorhandensein äußerer Felder existiert. Im einfachsten Fall handelt es sich um eine ferromagnetische Fernordnung, bei der alle magnetischen Momente vom Betrag und Richtung her gleich sind. Der Umstand, daß die Fernordnung bestand hat, ohne das ein äußeres Feld anliegt, weist darauf hin, daß dieser Effekt auf der Wechselwirkung der magnetischen Momente untereinander beruht.

Eine einfache Abschätzung zeigt, daß die Dipol-Dipol-Wechselwirkung auch nicht für die magnetische Fernordnung verantwortlich sein kann, da die Größenordnung dieser Wechselwirkung um ein Vielfaches zu klein ist. Die auftretenden Energien würden Übergangstemperaturen T_c unterhalb $1K$ entsprechen - im Gegensatz zu den im Experiment gemessenen Werten von $T_c = 1043K$ für *Fe*, $1393K$ für *Co* oder $613K$ für *Ni*.

Die Ursache für das Auftreten der magnetischen Fernordnung ist die von W. Heisenberg [13] und P. A. M. Dirac [14] unabhängig von einander gefundene quantenmechanische Austauschwechselwirkung. Sie führt im einfachen Fall auf den folgenden Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad . \quad (2.1)$$

Die $\hat{\mathbf{S}}_i$ sind hierbei Drehimpulsoperatoren, welche den Spin auf dem Gitterplatz i repräsentieren.

Betrachtet man anstelle dieses quantenmechanischen Modells Gl. 2.1 das klassische Heisenberg Modell, so sind die Operatoren $\hat{\mathbf{S}}_i$ durch Vektoren \mathbf{S}_i zu ersetzen, welche die magnetischen Momente μ mit $\mu_s = |\mu|$ darstellen und im allgemeinen auf Eins normiert sind $\mathbf{S}_i = \mu_i/\mu_s$. Die korrespondierende Hamiltonfunktion ist dann gegeben durch

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad . \quad (2.2)$$

Unabhängig von quantenmechanischer oder klassischer Beschreibung stellt J_{ij} die Austauschwechselwirkungskonstante dar, welche sich aus der Berechnung der quantenmechanischen Austauschintegrale ergibt und zu denen es kein klassisches Analogon gibt.

Liegt der Fall vor, daß $J_{ij} > 0$ ist, so sind im Grundzustand die magnetischen Momente parallel ausgerichtet und man spricht von einer ferromagnetischen Ordnung oder kurz vom Ferromagnetismus. Im Fall $J_{ij} < 0$ ordnen die magnetischen Momente hingegen antiparallel (soweit es die Gitterstruktur zuläßt), in diesem Fall spricht man vom Antiferromagnetismus.

2.1 Verallgemeinerung und Erweiterung des Heisenberg Modells

In dem hier vorliegenden Fall (Gl. 2.1) spricht man von dem isotropen Heisenberg oder XXX -Modell, da die Austauschwechselwirkung zwischen den Spins für alle drei Raumrichtungen gleich, also isotrop ist. Das Heisenberg Modell läßt sich nun verallgemeinern zu

$$\mathcal{H}_{XYZ} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y + J_{ij}^z S_i^z S_j^z \right] . \quad (2.3)$$

Dies ist das anisotrope oder XYZ -Modell.

Je nach Wahl der Kopplungskonstanten lassen sich verschiedene Fälle betrachten. So liegt mit $J_{ij}^x = J_{ij}^y = J_{ij}^z = J_{ij}$ der Spezialfall des isotropen Heisenberg Modells vor. Bei $J_{ij}^x = J_{ij}^y \neq J_{ij}^z$ spricht man von dem XXZ Modell und bei $J_{ij}^x, J_{ij}^y \neq 0$ und $J_{ij}^z = 0$ von dem XY -Modell.

Es bleibt die Frage nach der physikalischen Bedeutung der unterschiedlichen Kopplungskonstanten. Diese wird klar, wenn man den Hamiltonoperator Gl. 2.1 umschreibt. Dazu zerlegt man zunächst die Austauschwechselwirkungskonstante in einen isotropen Anteil J_{ij} und einen Differenzanteil d_{ij}^α , $\alpha \in x, y, z$, welcher die Abweichung von dem isotropen Anteil beschreibt, z.B.:

$$\begin{aligned} J_{ij}^x &= J_{ij} + d_{ij}^x \\ J_{ij}^y &= J_{ij} \\ J_{ij}^z &= J_{ij} + d_{ij}^z \end{aligned}$$

Damit läßt sich Gl. 2.3 schreiben als

$$\mathcal{H}_{XYZ} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{2} \sum_{i,j} d_{ij}^x S_i^x S_j^x - \frac{1}{2} \sum_{i,j} d_{ij}^z S_i^z S_j^z . \quad (2.4)$$

Der erste Summand ist die isotrope Heisenbergfunktion Gl. 2.1 und der zweite sowie der dritte Summand sind Anisotropieterme, welche als Zweiionenanisotropie bezeichnet werden. Neben der Zweiionen- oder Austauschanisotropie gibt es unter Umständen noch weitere Anisotropien, eine davon ist die Einionenanisotropie oder uniaxiale Anisotropie

$$\mathcal{H}_D = -D \sum_i (S_i^\alpha)^2 . \quad (2.5)$$

Analog zur Zweiionenanisotropie kennzeichnet ein positiver Vorfaktor, in diesem Fall die Anisotropiekonstante $D > 0$, eine Bevorzugung der Achsenrichtung $\alpha \in x, y, z$. In diesem Fall spricht man von einer leichten Achse. $D < 0$ bedeutet hingegen eine schwere Achsenrichtung bzw. eine leichte Ebene, da sich die magnetischen Momente in der Ebene mit der schweren Achse als Normalen orientieren werden. Neben der Einionen- und der Zweiionenanisotropie gibt es noch eine Reihe weiterer Anisotropien höherer Ordnung, auf welche aber nicht näher eingegangen werden soll. Die Ursache dieser Kristallanisotropien ist die Spin-Bahn-Kopplung, welche den Spin an das Kristallgitter koppelt und Anisotropien erzeugt, die von der Kristallstruktur abhängen.

Neben der Kristallanisotropie existiert noch eine weitere Art, die Form- oder Entmagnetisierungsanisotropie, welche von der Form des Festkörpers abhängt. Die Ursache der Formanisotropie ist in der langreichweitigen Dipol-Dipol Wechselwirkung zu suchen,

$$\mathcal{H}_\omega = -\omega \sum_{i < j} \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} . \quad (2.6)$$

Die Stärke der dipolaren Kopplung ist dabei durch $\omega = \frac{\mu_0 \mu_s^2}{4\pi a^3}$ gegeben, wobei es sich bei μ_0 um die Feldkonstante handelt. Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich kubische Gitter betrachtet, dabei ist a die Gitterkonstante und \mathbf{e}_{ij} die Einheitsvektoren, welche in Richtung \mathbf{r}_{ij} weisen.

Nun lassen sich noch weitere Wechselwirkungen im Rahmen des Heisenberg Modells betrachten, so ist z.B. die Wechselwirkung der magnetischen Momente mit einem äußeren Magnetfeld \mathbf{B} durch den sogenannten Zeeman Term,

$$\mathcal{H}_B = -\mu_s \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i , \quad (2.7)$$

gegeben. Dieser Energiebeitrag ist minimal, wenn die magnetischen Momente parallel zum äußeren Feld orientiert sind.

2.2 Verbindung zum Mikromagnetismus

Mit dem im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen klassischen Heisenberg Modell lassen sich sehr gut Computersimulationen durchführen, allerdings stößt man auf Probleme wenn man versucht, Domänenstrukturen analytisch zu berechnen. Diese Probleme kommen im wesentlichen von der diskreten Natur des Heisenberg Modells. Um das klassische Heisenberg Modell dennoch analytisch lösen zu können, geht man im allgemeinen zu einer Kontinuumsnäherung über. Die Bedingung hierfür ist eine stetige Magnetisierung.

Der Erste, der sich mit diesem Problem beschäftigt hat, war F. Bloch [15]. Er erkannte, daß es nicht möglich ist, sowohl die Austauschwechselwirkung, als auch

die Kristallanisotropie und die Dipol-Dipol-Wechselwirkung quantenmechanisch vollständig zu behandeln. Bloch schlug deshalb eine klassische Kontinuumsnäherung vor, welche die Absolutquadrate der Wellenfunktionen als Spindichte deutet. L. D. Landau und E. M. Lifshitz [16] verwendeten erstmals die heute gebräuchliche Form des Mikromagnetismus, wobei W. Döring [17, 18] darauf hinweist, daß diese Schreibweise identisch ist mit der von F. Bloch. Der heute gebräuchliche Name Mikromagnetismus geht seinerseits auf W. F. Brown zurück, welcher sich maßgeblich an der Weiterentwicklung dieser Theorie beteiligte [19]. Der Name Mikromagnetismus ist allerdings irreführend, da die mikroskopischen Details der atomistischen Struktur vernachlässigt werden.

Der Übergang, von der diskreten zur kontinuierlichen Darstellung, erfolgt indem man die magnetischen Momente \mathbf{S}_i als (reduzierte) Magnetisierung $\mathbf{S}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r})/M_s$ auffaßt, welche vom Ort \mathbf{r} abhängt und kontinuierlich ist. Die diskreten Summen werden dabei durch Integrale über den Raum ersetzt $\sum_i \rightarrow \frac{1}{a^3} \int_V dV$. a ist hierbei die Gitterkonstante.

Die mikromagnetische Energie der Kristallanisotropie, sowie die Zeemanenergie lassen sich einfach hinschreiben als

$$E_D = -K \int_V S_z^2 dV \quad (2.8)$$

und

$$E_B = -M_s \int_V \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} dV \quad (2.9)$$

Die Anisotropiekonstante K ist dabei mit der Anisotropiekonstante des (diskreten) Heisenberg Modells D verknüpft durch $D = Ka^3$ und die Sättigungsmagnetisierung M_s durch $\mu_s = M_s a^3$.

Die Austauschenergie läßt sich nicht so einfach angeben, da hier eine Wechselwirkung zwischen zwei magnetischen Momente an unterschiedlichen Orten auftritt. Beim Übergang vom diskreten Modell hin zur mikromagnetischen Näherung wird weiterhin noch die Bedingung gestellt, daß sich die Magnetisierung zwischen den Gitterplätzen nur leicht ändern soll, nur so ist der Übergang überhaupt möglich. Diese Bedingung kann man sich zu Nutze machen. Man entwickelt dazu die Magnetisierung $S_{1,2}$ zweier magnetischer Momente, einer linearen Kette, lokalisiert bei $\mathbf{r}_1 = (x - b)\mathbf{e}_x$ und $\mathbf{r}_2 = (x + b)\mathbf{e}_x$ um x und erhält $\mathbf{S}_1(x - b) \approx \mathbf{S}(x) - b \frac{\partial \mathbf{S}(x)}{\partial x}$ und $\mathbf{S}_2(x + b) \approx \mathbf{S}(x) + b \frac{\partial \mathbf{S}(x)}{\partial x}$. Die korrespondierende Austauschwechselwirkung ergibt sich dann als

$$-J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \approx -J + Jb^2 \left(\frac{\partial \mathbf{S}(x)}{\partial x} \right)^2, \quad (2.10)$$

da $(\mathbf{S}(x))^2 = 1$. Der erste Summand auf der rechten Seite von Gl. 2.10 stellt nur eine Verschiebung der Energieskala dar und kann bei der weiteren Betrachtung weg-

gelassen werden. Die Austauschenergie ergibt sich dann als

$$E_J = A \int_V (\nabla \mathbf{S})^2 dV \quad , \quad (2.11)$$

wobei die mikromagnetische Austauschkonstante A gegeben ist durch $A = \frac{cJ}{2a}$.¹ c ist dabei noch eine Konstante, welche vom Gittertyp abhängt [20]. Im Fall des einfach kubischen Gitters ist $c = 1$.

Die Energie der Dipol-Dipol Wechselwirkung wird im allgemeinen nicht aus dem diskreten Heisenberg Modell abgeleitet, sondern es werden entsprechende Integrale aus der Magnetostatik verwendet,

$$E_\omega = -\frac{\mu_0}{2} \int_v \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_S dV \quad , \quad (2.12)$$

wobei es sich bei \mathbf{H}_S um das Streufeld der kontinuierlichen Magnetisierungsverteilung handelt.

Die Gesamtenergie läßt sich somit schreiben als

$$E = \int_V \left[A (\nabla \mathbf{S})^2 - K S_z^2 - M_s \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} - \frac{\mu_0}{2} \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}_S \right] dV \quad . \quad (2.13)$$

Im nächsten Kapitel (Kap. 3) wird mit der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung die klassische Bewegungsgleichung des Heisenberg Modells hergeleitet und diskutiert. Dabei werden zunächst keine Temperatureffekte betrachtet. Die Thermodynamik wird anschließend in Kap. 4 betrachtet.

¹Da immer zwei magnetische Momente berücksichtigt werden beträgt das Normierungsvolumen $a^3/2$.

Hinter der Kurzschreibweise $(\nabla \mathbf{S})^2$ verbirgt sich der mathematisch korrektere Ausdruck:
 $(\Delta S_x)^2 + (\Delta S_y)^2 + (\Delta S_z)^2$

3 Die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung

In dem vorangegangenen Kapitel wurde das Heisenberg Modell betrachtet, es wurde dabei nichts über die zeitliche Entwicklung der magnetischen Momente, also über die Dynamik gesagt. Um die Dynamik zu betrachten ist es notwendig, eine Bewegungsgleichung für das Heisenberg Modell aufzustellen. Im Fall des quantenmechanischen Modells wäre dies die Heisenberg'sche Bewegungsgleichung. Im Fall des klassischen Heisenberg Modells ist die Bewegungsgleichung die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung. Diese phänomenologische Gleichung besteht aus zwei Summanden, dem Präzessionsterm und dem hinzugefügten Dämpfungs- oder Relaxationsterm. Der Präzessionsterm wurde ursprünglich von Landau und Lifshitz aus Plausibilitätsüberlegungen hergeleitet [16]. Dieser Term läßt sich aber sowohl klassisch [21] als auch quantenmechanisch [17, 22] exakt herleiten. Die quantenmechanische Herleitung der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung soll im Folgenden kurz skizziert werden.

3.1 Herleitung der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung

Ausgangspunkt ist die bereits erwähnte Heisenberg'sche Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{\partial \langle \hat{\mathbf{S}}_i(t) \rangle}{\partial t} = \langle [\hat{\mathbf{S}}_i(t), \hat{\mathcal{H}}] \rangle \quad (3.1)$$

mit dem zeitabhängigen Spinoperator $\hat{\mathbf{S}}_i(t)$.

Setzt man den Hamiltonoperator des isotropen Heisenberg Modells ein und berechnet den Kommutator $[\hat{\mathbf{S}}_i(t), \hat{\mathcal{H}}]$ unter Verwendung der Vertauschungsregel

$$[\hat{\mathbf{S}}_i^x, \hat{\mathbf{S}}_j^y] = i\hbar \delta_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i^z \quad (+ \text{zyklische Vertauschung}),$$

so ergibt sich für das isotrope Heisenberg Modell¹

$$[\hat{\mathbf{S}}_i, \hat{\mathcal{H}}] = i\hbar \left(\hat{\mathbf{S}}_i \times \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\mathbf{S}}_i} \right) . \quad (3.2)$$

Diese Kommutatorregel ist allgemeingültig für alle Operatoren \hat{A} , für die gilt

$$\hat{A} \times \hat{A} = \hat{A} .$$

Die Gleichung Gl. 3.2 ist auch dann noch richtig, wenn man zu dem isotropen Heisenberg Modell zusätzlich noch den Zeeman Term und die Dipol-Dipol Wechselwirkung zuläßt, oder wenn man anstatt des isotropen Heisenberg Modells das XYZ-Modell, also das Heisenberg Modell mit Austauschisotropie verwendet. Einzig die uniaxialen (Einionen-) Anisotropieterme liefern einen Korrekturterm von der Ordnung \hbar^2 , Anisotropien höherer Ordnung bewirken entsprechend Korrekturterme höherer Ordnung in \hbar .

Nun läßt sich somit die Heisenberg'sche Bewegungsgleichung schreiben als

$$\frac{\partial \langle \hat{\mathbf{S}}_i \rangle}{\partial t} = \left\langle \hat{\mathbf{S}}_i \times \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\mathbf{S}}_i} \right\rangle + \mathcal{O}(\hbar) . \quad (3.3)$$

Man beachte, daß \hbar explizit nur noch in dem Korrekturterm auftritt.

Im Fall des quantenmechanischen Heisenberg Modells würde man diese Gleichung lösen. Der Übergang zur klassischen Bewegungsgleichung $\hbar \rightarrow 0$ geschieht unter Ausnutzung des Ehrenfest Theorems, wonach $\mathbf{s}_i = \langle \hat{\mathbf{S}}_i \rangle$ und $\mathcal{H} = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$ ist, also

$$\frac{\partial \mathbf{s}_i}{\partial t} = \mathbf{s}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{s}_i} . \quad (3.4)$$

Der Spin \mathbf{s} ist dabei mit dem magnetischen Moment durch die folgende Relation $\mathbf{s} = \boldsymbol{\mu}/\gamma$ verknüpft. Bei freien Elektronen ist $\gamma = g\mu_B/\hbar > 0$ das gyromagnetische Verhältnis, g ist der Landé Faktor und μ_B ist das Bohr'sche Magneton. \mathcal{H} ist die klassische Hamilton-Funktion.

Normiert man das magnetische Moment noch auf Eins $\mathbf{S}_i = \boldsymbol{\mu}_i/\mu_s = -\gamma\mathbf{s}_i/\mu_s$, so erhält man aus Gl. 3.4 folgende Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_s} \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) . \quad (3.5)$$

¹Hinweis: Unter $\frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{\mathbf{S}}_i}$ soll der Gradient

$$\text{grad}_{\hat{\mathbf{S}}_i} \hat{\mathcal{H}} = \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{S}_{ix}} \mathbf{e}_x + \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{S}_{iy}} \mathbf{e}_y + \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{S}_{iz}} \mathbf{e}_z$$

verstanden werden und nicht, wie in der Mathematik, die Richtungsableitung

$$\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \text{grad}_{\mathbf{r}} \hat{\mathcal{H}} = \hat{S}_{ix} \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial x} + \hat{S}_{iy} \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial y} + \hat{S}_{iz} \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial z} .$$

3 Die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung

Bei der Gleichung Gl. 3.5 handelt es sich um die ungedämpfte Landau-Lifshitz Gleichung. Der Dämpfungsterm in der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung läßt sich nicht herleiten und muß daher phänomenologisch hinzugenommen werden. Mit ihm wird der Tatsache Rechnung getragen, daß in den magnetischen Systemen Dissipationseffekte, also Reibung, auftritt.

Landau und Lifshitz fügten als Dämpfungsterm folgenden Summanden hinzu

$$-\frac{\lambda}{\mu_s} \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) . \quad (3.6)$$

Während der Präzessionsterm eine Präzession, also eine Kreisbewegung, der magnetischen Momente beschreibt handelt es sich hier um einen Vektor, welcher senkrecht dazu steht und die magnetischen Momente in Richtung des internen Feldes $\mathbf{H}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i}$ drängt. Aufgrund der Reibung kommt es somit zu einer Relaxationsbewegung. Die phänomenologische Konstante λ gibt dabei die Stärke der Dämpfung an.

Die sich aus dem Zusammenfügen der ungedämpften Landau-Lifshitz Gleichung Gl. 3.5 und dem Dämpfungsterm Gl. 3.6 sich ergebende Gleichung

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_s} \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) - \frac{\lambda}{\mu_s} \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) \quad (3.7)$$

wird Landau-Lifshitz Gleichung genannt.

Nun stellt sich aber heraus, daß dieser relativ einfache Dämpfungsterm zu falschen

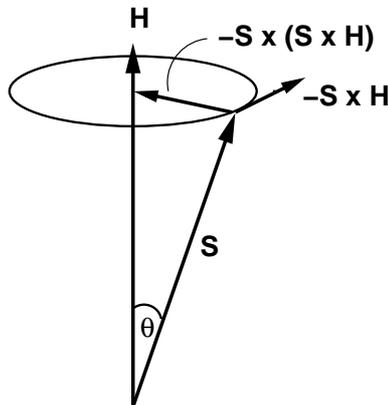


Abbildung 3.1: Relaxation $-\mathbf{S} \times (\mathbf{S} \times \mathbf{H})$ und Präzession $\mathbf{S} \times \mathbf{H}$ eines magnetischen Momentes \mathbf{S} in einem internen Feld $\mathbf{H} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}}$.

Ergebnissen führt, wenn man zu großen Dämpfungen ($\lambda \rightarrow \infty$) übergeht [23]. So nimmt z.B. die Ummagnetisierungszeit einer homogen magnetisierten Kugel mit zunehmender Dämpfung ab, obwohl sich physikalisch die magnetischen Momente mit

zunehmender Dämpfung langsamer bewegen sollten und somit die Ummagnetisierungszeit zunehmen müßte.

Erstaunlich hierbei ist der Zeitraum von fast zwanzig Jahren, bis dieses unphysikalische Verhalten bemerkt wurde. 1955 ersetzte Gilbert [24, 25] den Dämpfungsterm durch eine Rayleigh-Dissipationsfunktion. Die sich so ergebende Gleichung

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_s} \mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} + \alpha \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} \right) \quad (3.8)$$

wird als Gilbert Gleichung bezeichnet und ist in Polarkoordinaten geschrieben,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\alpha \sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\gamma}{\mu_s \sin \theta} \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \phi} , \quad (3.9)$$

und

$$\sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\gamma}{\mu_s} \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \theta} , \quad (3.10)$$

Ausgangspunkt vieler analytischer Rechnungen. $\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \phi}$ bzw. $\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \theta}$ sind dabei die Variationen der Energiedichte \mathcal{E} nach ϕ bzw. θ . Rechnungen mit der Gilbert Gleichung ergaben nun auch im Bereich großer Dämpfungen physikalisch sinnvolle Ergebnisse. Die Dämpfungskonstante α ist anders als die Dämpfungskonstante λ von Landau und Lifshitz dimensionslos und wird als Gilbert Dämpfung bezeichnet. Es handelt sich hierbei ebenso wie bei λ um eine phänomenologische Konstante, welche die Stärke einer konstanten Energiedissipation beschreibt. Die Mechanismen, welche zur Energiedissipation führen, sind heutzutage noch nicht ganz verstanden und Gegenstand derzeitiger Untersuchungen [26–28].

Bei der Gilbert Gleichung geht die zeitliche Ableitung sowohl auf der linken, als auch auf der rechten Seite ein. Die macht das Lösen dieser Differentialgleichung etwas komplizierter. Es ist allerdings möglich, die Gilbert Gleichung in Form der Landau-Lifshitz Gleichung zu schreiben, so daß die zeitliche Ableitung nur einmal eingeht.

Ausgangspunkt ist die Gilbert Gleichung Gl. 3.8. Auf diese wird von links $\mathbf{S} \times$ auf beide Seiten der Gleichung angewendet

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} &= -\frac{\gamma}{\mu_s} \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) + \alpha \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} \right) \\ &= -\frac{\gamma}{\mu_s} \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) + \alpha \mathbf{S}_i \left(\mathbf{S}_i \cdot \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} \right) - \alpha \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Im zweiten Schritt wurde die Leibnitz-Regel

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) . \quad (3.12)$$

verwendet. Jetzt ist

$$\mathbf{S}_i \cdot \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{S}_i^2}{\partial t} = 0 \quad (3.13)$$

d.h. $|\mathbf{S}_i| = 0$ (die Länge des Spins ist konstant). Damit ergibt sich

$$\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_s} \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) - \alpha \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} . \quad (3.14)$$

Setzt man dies in die Gilbert Gleichung Gl. 3.8 ein, so erhält man

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{(1 + \alpha^2) \mu_s} \mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} - \frac{\alpha \gamma}{(1 + \alpha^2) \mu_s} \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) . \quad (3.15)$$

Diese Gleichung wird als Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung bezeichnet. Man beachte, daß jetzt in beiden Summanden der Gleichung die Dämpfungskonstante α enthalten ist.

Diese Gleichung besitzt wieder die einfache Anschaulichkeit der Landau-Lifshitz Gleichung. Der Unterschied zur Landau-Lifshitz Gleichung liegt nun darin, daß dort die Dämpfung darin bestand, die magnetischen Momente in Richtung des internen Feldes zu zwingen ohne dabei die Präzessionsbewegung zu beeinflussen. Die Gilbertdämpfung sorgt nun dafür, daß die magnetischen Momente in Richtung des internen Feldes ausrichten, und sich gleichzeitig die Präzessionsfrequenz mit der Dämpfung ändert. An dieser Stelle muß allerdings gesagt werden, daß im Grenzfall kleiner Gilbertdämpfungen $\alpha \ll 1$ die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung und die Landau-Lifshitz Gleichung identisch sind, da in diesem Fall das α^2 im Nenner vernachlässigt werden kann und $\lambda = \alpha \gamma$ bekanntlich von der Dimension des gyromagnetischen Verhältnisses γ ist.

3.2 Verwandte Bewegungsgleichungen

Der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung kommt nun eine große Bedeutung in der Physik zu. Dies äußert sich bereits darin, daß eine ganze Reihe von Abhandlungen existieren, welche die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung enthalten [25, 29–37]. Weiterhin findet man eine Reihe von abgewandelten Formen, so existieren neben den erwähnten Gleichungen noch die Landau-Lifshitz-Bloch Gleichung [38], die Bloch-Bloembergen Gleichung [39] und die Callen Gleichung [40, 41]. Den meisten dieser Gleichungen ist gemeinsam, daß sie sich als folgende Entwicklung auffassen lassen [40]

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = A + B \mathbf{S}_i + C \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) + D \left(\mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) \right) + \dots , \quad (3.16)$$

wobei die Koeffizienten in den jeweiligen Fällen Konstanten sind.

Interessant ist der Zusammenhang zwischen der Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung und anderen Gleichungen der Physik, insbesondere aus der Solitonen-Theorie. Es läßt sich auch zeigen, daß sich die Landau-Lifshitz-Gilbert-Gleichung in einigen Fällen in die Sine-Gordon-Gleichung transformieren läßt [42, 43]. Dies soll hier kurz skizziert werden.

Hierzu betrachtet man eine lineare Kette. Die Dynamik wird beschrieben durch die ungedämpfte Landau-Lifshitz-Gleichung für das magnetische Moment \mathbf{M} in Kontinuumsnäherung

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma \mathbf{M} \times \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \mathbf{M}} . \quad (3.17)$$

Es soll keine Reibung, also Dämpfung vorliegen.

Das interne Feld berechnet sich aus der Variation der Energiedichte \mathcal{E}

$$\mathcal{E} = A \left(\frac{\partial M_x}{\partial x} \right)^2 - K M_z^2 + 2\pi M_x^2 . \quad (3.18)$$

Die einzelnen Summanden sind dabei in mikromagnetischer Schreibweise. Der erste Summand ist die Austauschwechselwirkung. Der zweite Summand ist Anisotropie-term, welcher eine leichte Achsenrichtung in z -Achsenrichtung vorgibt. Der letzte Summand ist der Entmagnetisierungsterm, welcher von der Dipol-Dipol Wechselwirkung herrührt.

Für die weitere Rechnung ist es zweckmäßig zu Polarkoordinaten überzugehen. Die Landau-Lifshitz-Gleichung läßt sich dann schreiben als

$$\begin{aligned} M \sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\gamma \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \theta} \\ M \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial t} &= \gamma \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \phi} , \end{aligned} \quad (3.19)$$

$M = |\mathbf{M}|$ ist dabei der Betrag der Magnetisierung. Die Energiedichte Gl. 3.18 schreibt sich nun in Polarkoordinaten als

$$\mathcal{E} = A \left[\sin^2 \theta \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 \right] - K \cos^2 \theta + 2\pi M^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi . \quad (3.20)$$

Setzt man dies in Gl. 3.19 ein so erhält man

$$\begin{aligned} -\gamma^{-1} M \sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial t} &= A \sin 2\theta \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 - 2A \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + K \sin 2\theta + 2\pi M^2 \cos^2 \phi \sin 2\theta \\ -\gamma^{-1} M \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial t} &= 2A \frac{\partial}{\partial x} \left(\sin^2 \theta \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + 2\pi M^2 \sin^2 \theta \sin 2\phi . \end{aligned} \quad (3.21)$$

An dieser Stelle ist es notwendig noch einige Annahmen zu treffen. So soll $\phi = \frac{\pi}{2} + \epsilon$ konstant sein, wobei mit $\epsilon \ll 1$ kleine Abweichungen zugelassen werden sollen. Weiterhin soll $\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$ gelten, d. h. ϕ soll sich räumlich nicht ändern. Mit diesen Annahmen lassen sich die Gleichungen 3.21 bis zur 1. Ordnung in ϵ entwickeln, dadurch erhält man folgende Gleichungen

$$-\gamma^{-1} M \sin \theta \frac{\partial \epsilon}{\partial t} \approx K \sin 2\theta - 2A \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \quad (3.22)$$

$$-\gamma^{-1} M \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial t} \approx -4\pi M^2 \epsilon \sin^2 \theta$$

Nach Eliminierung von ϵ erhält man

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} = -4\pi\gamma^2 \left(K \sin 2\theta - 2A \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) . \quad (3.23)$$

Mit den folgenden Substitutionen

$$\psi = 2\theta, \quad c_0 = \sqrt{8\pi\gamma^2 A}, \quad \omega_0 = \sqrt{8\pi\gamma^2 K} \quad (3.24)$$

ergibt sich letztlich die Sine-Gordon Gleichung

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \omega_0^2 \sin \psi = 0 . \quad (3.25)$$

Man beachte, daß die magnetischen Eigenschaften, wie die Austauschwechselwirkung, die Anisotropie etc. in den Konstanten ω_0 und c_0 verborgen sind. Von der Dimension her ist c_0 eine Geschwindigkeit und ω_0 eine Frequenz. Weiterhin sollte man beachten, daß in die Sine-Gordon Gleichung die Dämpfung nicht eingeht, sowie ein äußeres Magnetfeld nur in die Konstanten [42, 43]. Diese Terme lassen sich, zur besseren Anpassung an die Realität, zur Sine-Gordon Gleichung hinzufügen [44].

Als letztes sollte man sich noch vor Augen führen, daß die erste Substitution $\psi = 2\theta$ den Unterschied zwischen Solitonen und Domänenwänden ausmacht. Während sich ein Soliton, z.B. ein Kink, und ein Antisoliton (Antikink)², welche auf einander zulaufen, sich durchdringen ohne zu wechselwirken³, löschen sich zwei Domänenwände

²Unter einem Kink/Antikink versteht man die einfachste Solitonenlösung der Sine-Gordon Gleichung

$$\psi = 4 \arctan \left[\pm \exp \left(\frac{x}{\Delta} \right) \right]$$

Man kann zeigen, daß dies identisch ist mit der Form einer 180° Domänenwand

$$\sin \theta = \sin \left(\frac{\psi}{2} \right) = \pm \tanh \left(\frac{x}{\Delta} \right)$$

Der Unterschied zwischen einem Kink und Antikink besteht nur in dem Vorzeichen vor der Exponentialfunktion.

³Es tritt lediglich eine Phasenverschiebung auf [45].

aus. Auch wenn die Form eines Kinks mit der Form einer 180° Domänenwand identisch ist, so liegen mit 180° Domänenwänden keine echten Solitonen vor, obwohl die Solitentheorie, was Statik und Dynamik betrifft, durchaus auf die Theorie der Domänenwände übertragen werden kann.

Nachdem bisher der Zusammenhang zwischen der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung und Sine-Gordan Gleichung aus der Solitentheorie gezeigt wurde, soll an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, daß sich im Rahmen der Bewegung von Domänenwänden die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung auch in Form einer Newton'schen Bewegungsgleichung schreiben läßt, wobei es notwendig ist eine neue Größe, die Döring Masse m_D [29, 46], zu definieren:

$$m_D \ddot{q} + b\dot{q} + kq = 2MB \quad , \quad (3.26)$$

mit der Döring Masse

$$m_D = \frac{(1 + \alpha^2)}{2\pi\gamma^2} \sqrt{\frac{K}{A}} \quad . \quad (3.27)$$

Neben dem Beschleunigungsterm $m_D \ddot{q}$ und der treibenden Kraft pro Fläche $P = 2MB$, welche von einem äußeren Magnetfeld B kommt, stellen die einzelnen Summanden einen viskosen Reibungsterm ($b\dot{q}$) und einen Term dar, welcher von einer rücktreibenden Kraft herrührt (kq). Es bleibt hier jedoch anzumerken, daß es sich von der Dimension her bei den einzelnen Termen um Drücke handelt und nicht um Kräfte. Auf eine genaue Herleitung bzw. Diskussion soll allerdings an dieser Stelle verzichtet werden. Eine genaue Herleitung ist in [29] zu finden. Die Döring Masse wird allerdings in Kapitel 6.3 im Rahmen der Domänenwanddynamik noch einmal explizit hergeleitet werden.

Bis jetzt wurde nur das Heisenberg Modell eingeführt und die Dynamik betrachtet. Es wurde allerdings noch nichts über die Thermodynamik des Heisenberg Modells gesagt. Dies soll im nächsten Kapitel geschehen.

4 Die Gleichgewichtsthermodynamik des Heisenberg Modells

4.1 Thermische Mittelung und Molekularfeldnäherung

Bei dem Heisenberg Modell handelt es sich um ein Vielkörper Problem, welches sich im allgemeinen nicht geschlossen lösen läßt. Die Molekularfeldnäherung stellt eine Möglichkeit dar, erste qualitative Aussagen über das thermodynamische Verhalten ferromagnetischer Materialien zu treffen. Die Ursprüngliche Näherung geht auf P. Weiss (1907) zurück, lange bevor die Quantenmechanik erfunden wurde. In dieser Arbeit ist auch noch nicht von einer Molekularfeldnäherung die Rede, da dieser Formalismus ebenfalls erst später entwickelt wurde. Allerdings läßt sich zeigen, daß es bei der Arbeit von Weiss um eine Molekularfeldnäherung handelt.

Abweichend von dieser Arbeit soll von dem isotropen Heisenberg Modell ausgegangen werden

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad . \quad (4.1)$$

Mit $\mathbf{S}_i = (\mathbf{S}_i - \langle \mathbf{S}_i \rangle) + \langle \mathbf{S}_i \rangle$ läßt sich Gl. 4.1 exakt umformen zu

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{m}_j - \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + (\mathbf{S}_i - \mathbf{m}_i) (\mathbf{S}_j - \mathbf{m}_j) \} \quad . \quad (4.2)$$

Die Molekularfeldnäherung besteht nun darin die Korrelationen der Fluktuationen wegzulassen. Die Hamiltonfunktion \mathcal{H}_{MF} läßt sich dann schreiben als

$$\mathcal{H}_{MF} = \sum_i \mathbf{H}_i \cdot \mathbf{S}_i + A \quad , \quad (4.3)$$

mit dem effektiven Feld

$$\mathbf{H}_i = -J (\mathbf{m}_{i-1} + \mathbf{m}_{i+1}) \quad (4.4)$$

und

$$A = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \quad . \quad (4.5)$$

\mathbf{S}_i ist dabei die dynamische Variable und $\mathbf{m}_i = \langle \mathbf{S}_i \rangle$ der thermische Mittelwert, den es zu bestimmen gilt. Mit der Molekularfeldnäherung bietet sich die Möglichkeit, die

Gleichgewichtsthermodynamik des Heisenberg Modells zu untersuchen. Der thermische Mittelwert ergibt sich dabei ganz allgemein durch

$$\mathbf{m}_i = \langle \mathbf{S}_i \rangle = \frac{\text{Sp } \mathbf{S}_i e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{Sp } e^{-\beta \mathcal{H}}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (4.6)$$

wobei im Fall der Molekularfeldnäherung \mathcal{H} durch \mathcal{H}_{MF} zu ersetzen ist.

Die Spurbildung Sp ist dabei eine Summation über alle Konfigurationen. Im allgemeinen wird man die Berechnung des thermischen Mittelwertes \mathbf{m}_i der magnetischen Momente nicht analytisch durchführen, so daß man auf numerische Verfahren angewiesen ist.

Nun ist bekannt, daß die Molekularfeldnäherung nur eine grobe Näherung darstellt und man wird auf andere numerische Verfahren zurückgreifen müssen. Eine Möglichkeit, die Magnetisierung \mathbf{M} des Systems, welche sich aus der Konfigurationsmittelung

$$\mathbf{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \quad (4.7)$$

ergibt, zu berechnen ist, das Heisenberg Modell mittels Monte Carlo Rechnungen zu behandeln. Im Rahmen dieser Arbeit wird das sogenannte *heat bath* Monte Carlo Verfahren verwendet, welches in Kapitel 5.2 beschrieben wird. Mit dem Monte Carlo Verfahren läßt sich zunächst der zeitliche Mittelwert eines magnetischen Momentes bestimmen. Da Ergodizität angenommen werden kann, ist dieser zeitliche Mittelwert gleich dem thermischen Mittelwert, so daß sich die Magnetisierung bestimmen läßt. Weiterhin läßt sich die Magnetisierung ebenfalls mittels Langevin-Dynamik berechnen. Dazu wird die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung gelöst, wobei ein weißes Rauschen die Ankopplung an ein Wärmebad simuliert. Diese Gleichung wird stochastische Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung genannt. Die Herleitung und eine genaue Beschreibung der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung ohne Rauschen wurde in Kapitel 3 gegeben. Im nächsten Abschnitt wird genauer auf die stochastische Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung eingegangen und es wird gezeigt, daß es sich hierbei um eine Langevin Gleichung handelt.

4.2 Die stochastische Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung

Bis jetzt wurde die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung nur ohne Temperatur, also bei $T = 0$ betrachtet. Eine Möglichkeit ist die in dieser Arbeit verwendete Methode, welche auf W. F. Brown [47] zurückgeht, der in Anlehnung an die Langevin Gleichung das interne Feld \mathbf{H}_i um ein zeitabhängiges Rauschen erweiterte

$$\mathbf{H}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} + \boldsymbol{\xi}_i(t), \quad (4.8)$$

um so die thermischen Fluktuationen zu berücksichtigen. Das Rauschen wird charakterisiert durch die Verteilung der Momente, die durch die Integration der Wahrscheinlichkeitsverteilung gewonnen werden, gemäß

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i^\nu(t) \xi_j^\theta(t') \rangle = 2 \frac{\alpha \mu_s}{\gamma} k_B T \delta_{ij} \delta_{\nu\theta} \delta(t-t'), \quad (4.9)$$

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

Setzt man das interne Feld Gl. 4.8 in die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung Gl. 3.15 ein, so läßt sich diese aufgrund des additiven Rauschens in Form einer Langevin Gleichung schreiben

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \mathbf{f}_i + \mathbf{g}_i \xi_i, \quad (4.10)$$

wobei \mathbf{f} und $\mathbf{g}\xi$ gegeben sind durch

$$\mathbf{f}_i = \frac{\gamma}{(1+\alpha^2)\mu_s} \left[\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} + \alpha \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) \right] \quad (4.11)$$

und

$$\mathbf{g}_i \xi_i = - \frac{\gamma}{(1+\alpha^2)\mu_s} [\mathbf{S}_i \times \xi_i + \alpha \mathbf{S}_i \times (\mathbf{S}_i \times \xi_i)] . \quad (4.12)$$

Die auf diese Art gewonnene Gleichung wird Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung mit Langevin-Dynamik oder stochastische Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung genannt. Bei dieser Gleichung handelt es sich um eine stochastische Differentialgleichung, welche sich mittels numerischer Verfahren lösen läßt. Ein Verfahren, das Heun-Verfahren, wird in Kapitel 5.1 vorgestellt.

Zu der stochastischen Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung läßt sich ebenfalls die korrespondierende Fokker-Planck Gleichung angeben [38, 47, 48]

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial \mathbf{S}} \cdot \left\{ - \frac{\gamma}{(1+\alpha^2)\mu_s} \left[\mathbf{S} \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}} + \alpha \mathbf{S} \times \left(\mathbf{S} \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}} \right) \right] \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\tau_N} \mathbf{S} \times \left(\mathbf{S} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{S}} \right) \right\} P . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Diese Gleichung läßt sich mittels eines einfachen Ansatzes für die Wahrscheinlichkeit P in Form einer zeitabhängigen Schrödinger Gleichung schreiben [49]. Dies soll aber an dieser Stelle nicht weiter ausgeführt werden.

4.3 Die Thermodynamik des klassischen Heisenberg-Modells im Vergleich mit dem quantenmechanischen Heisenberg-Modells

Bisher wurde lediglich etwas über die Thermodynamik allgemein und über die stochastische Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung gesagt. In diesem Abschnitt soll die Thermodynamik des klassischen Heisenberg Modells mit der des quantenmechanischen Heisenberg Modells verglichen werden.

Abb. 4.1 zeigt die berechnete reduzierte Magnetisierung eines $16 \times 16 \times 16$ großen

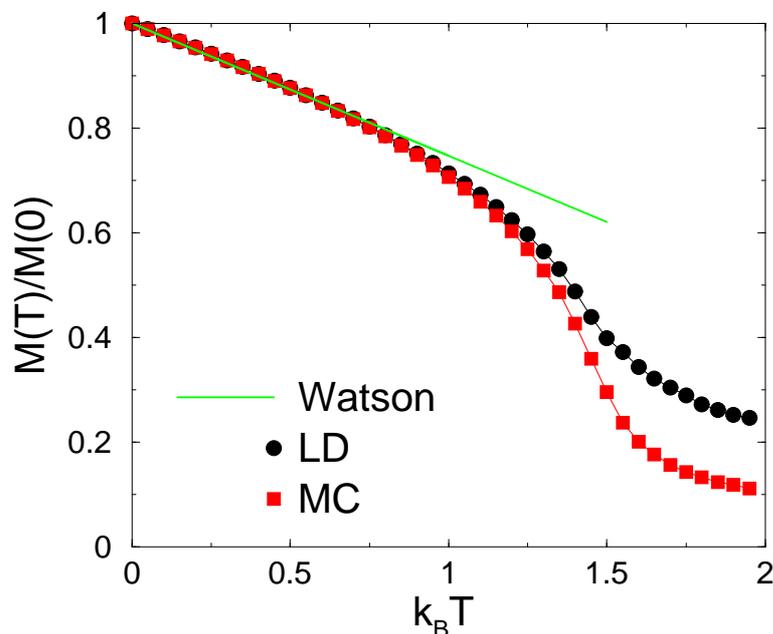


Abbildung 4.1: Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im Falle des klassischen isotropen Heisenberg Modells: Vergleich Langevin-Dynamik (LD, Heun Verfahren) mit dem *heat bath* Monte Carlo Algorithmus (MC).

Simuliert wurde ein Würfel mit 16^3 magnetischen Momenten. Aufgrund unterschiedlicher Zeitschritte beider Verfahren ist der *finite size* Effekt unterschiedlich stark ausgeprägt. ($D/J = 0$)

Würfels als Funktion der Temperatur. Die beiden Kurven wurden dabei mittels Langevin-Dynamik und einer *heat bath* Monte Carlo Rechnung gerechnet. Aufgrund der endlichen Größe des Systems ergeben sich *finite size* Effekte, welche sich darin äußern, daß die Magnetisierung nicht Null wird. Die unterschiedlich starke Ausprägung des Effektes, bei der Monte Carlo Rechnung ist die Magnetisierung kleiner

als bei der Langevin-Dynamik Simulation, bei gleichen Temperaturen, ist auf unterschiedliche Mittelungszeiten zurückzuführen. D.h. die Stärke dieses Effektes hängt davon ab, wie lange man die zeitliche Mittelung durchführt, wobei eine längere Mittelung zu besseren Ergebnissen führt.

Bei den bisher besprochenen Verfahren handelt es sich um klassische Verfahren, welche sich von den quantenmechanischen Rechnungen (Greenfunktion [50, 51], Quanten Monte Carlo [52]) durch die Verwendung einer anderen Statistik unterscheiden. Während bei den quantenmechanischen Rechnungen meist die Bose-Einstein Statistik zugrunde gelegt wird, wird bei den klassischen Verfahren eine klassische Besetzungszahl verwendet. Die Energiedispersion des klassischen und des quantenmechanischen Heisenberg Modells unterscheidet sich dabei nicht voneinander [17, 53, 54]. Thermodynamisch läßt sich die reduzierte Magnetisierung für tiefe Temperaturen berechnen durch

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 - \int dk \mathbf{n}_k , \quad (4.14)$$

wobei \mathbf{n}_k die Besetzungszahl und $M(0)$ die Sättigungsmagnetisierung bei einer Temperatur $T = 0$ K ist. Integriert wird über die erste Brillouinzone. Im Fall eines

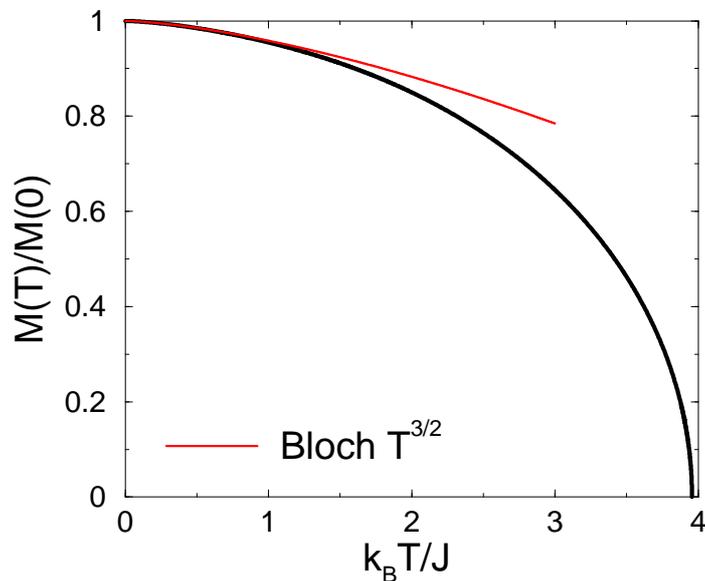


Abbildung 4.2: Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung im Fall des quantenmechanischen Heisenberg Modells mit Spinquantenzahl $S = \frac{1}{2}$. Die Rechnung ist mittels des sogenannten Greenfunktionsformalismus mit RPA-Näherung durchgeführt wurden [50, 51].

dreidimensionalen quantenmechanischen Heisenberg Modells ergibt sich dann

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 - \int d\mathbf{k} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{k_{\text{B}}T}\right) - 1} \sim 1 - \text{const.} \cdot T^{3/2} . \quad (4.15)$$

Dies ist das sogenannte Bloch'sche $T^{3/2}$ -Gesetz [15].

Klassisch ergibt sich hingegen das folgende Integral [55–57]

$$\frac{M(T)}{M(0)} = 1 - \int d\mathbf{k} \frac{k_{\text{B}}T}{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \sim 1 - \text{const.} \cdot T . \quad (4.16)$$

Im klassischen Fall hat man also einen linearen Abfall der Magnetisierung bei tiefen Temperaturen. Der lineare Abfall der Magnetisierung ist in 4.1 deutlich zu erkennen (Watson, [55]).

Abb. 4.2 zeigt die korrespondierende Magnetisierungskurve des isotropen quan-

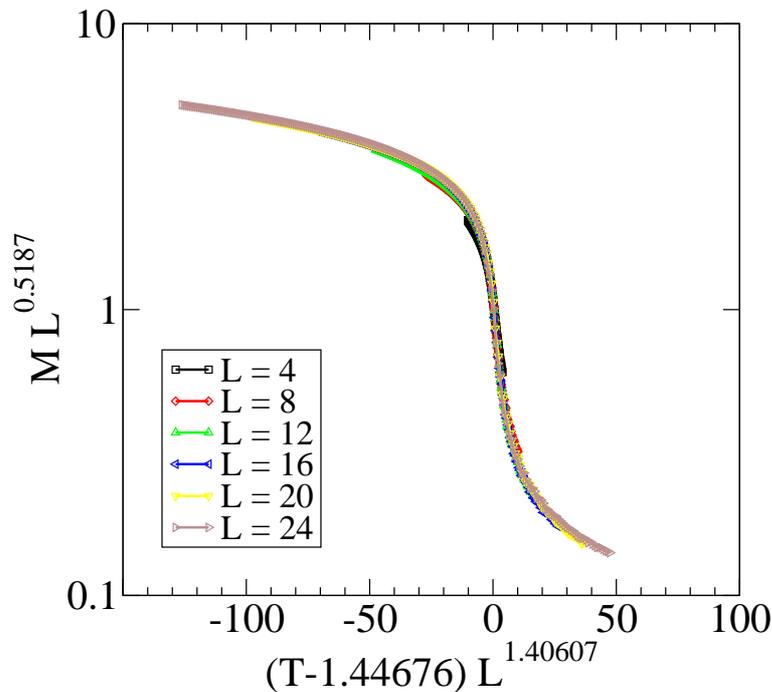


Abbildung 4.3: *finite size scaling* Plot des klassischen Heisenberg Modells gerechnet mit dem *heat bath* Monte Carlo Verfahren. ($D/J = 0$)

tenmechanischen Heisenberg Modells. Die Magnetisierung wurde dabei mit der Methode der Greenfunktionen mit RPA-Entkopplung berechnet. Kap. 5.4 geht darauf genauer ein. Zu erkennen ist hier das analytisch vorhergesagte Bloch'sche $T^{3/2}$ -Gesetz. Allerdings erkennt man auch, daß dieses Gesetz nur für einen sehr

kleinen Temperaturbereich Gültigkeit besitzt.

Das kritische Verhalten hingegen ist unabhängig davon ob das klassische oder quantenmechanische Heisenberg Modell betrachtet wird. Zwar hängt die kritische Temperatur, also die Curietemperatur, von der Spinquantenzahl S ab (klassisches Heisenberg Modell: $S \rightarrow \infty$), aber die kritischen Exponenten sind identisch, da in beiden Fällen die gleiche Universalitätsklasse vorliegt. Aus den Langevin-Dynamik bzw. Monte Carlo Simulationen lassen sich nun mittels *finite size scaling* zwei kritische Exponenten (ν und δ) bestimmen.

Abb. 4.3 zeigt einen *finite size scaling* Plot. Aufgetragen ist $ML^{1/\nu}$ über $(T-T_c)L^{\beta/\delta}$, wobei L die Systemgröße ist und M die Magnetisierung. $T - T_c$ ist die reduzierte Temperatur und ν und β sind kritische Exponenten. Zu erkennen ist, daß die aus der Literatur [58] bekannten kritischen Exponenten $\nu = 0.7112$ und $\beta = 0.3689 \Rightarrow \beta/\nu = 0.5187$, $1/\nu = 1.4060742$, zu einem Datenkollaps führen. Die kritische Temperatur ergibt sich aus der Simulation zu $T_c = 1.44676$, der in der Literatur angegebene Wert beträgt $T_c = 1.4427$ [51].

5 Numerische Verfahren

In diesem Kapitel werden die in dieser Arbeit verwendeten numerischen Verfahren und deren Realisierung vorgestellt. Dabei handelt es sich zum einen Teil um Verfahren, um die Gleichgewichtsthermodynamik zu untersuchen (lokale Molekularfeldnäherung, Methode der Greenfunktionen mit RPA-Entkopplung) und zum anderen Teil um Verfahren, um darüberhinaus die Dynamik von magnetischen Systemen zu beschreiben (Numerischen Integration der stochastischen Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung, *heat bath* Monte Carlo Simulation).

5.1 Numerische Integration der stochastischen Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung

Wie bereits in Kapitel 4.2 gezeigt wurde, läßt sich die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung aufgrund des additiven Rauschens in Form einer Langevin Gleichung

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \mathbf{f}_i + \mathbf{g}_i \boldsymbol{\xi}_i$$

schreiben, wobei \mathbf{f} und $\mathbf{g}\boldsymbol{\xi}$ gegeben sind durch

$$\mathbf{f}_i = \frac{\gamma}{(1 + \alpha^2) \mu_s} \left[\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} + \alpha \mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i} \right) \right]$$

und

$$\mathbf{g}_i \boldsymbol{\xi}_i = -\frac{\gamma}{(1 + \alpha^2) \mu_s} [\mathbf{S}_i \times \boldsymbol{\xi}_i + \alpha \mathbf{S}_i \times (\mathbf{S}_i \times \boldsymbol{\xi}_i)] .$$

Da es sich bei der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung um eine vektorielle Differentialgleichung handelt, handelt es sich bei der zugehörigen Langevin Gleichung ebenfalls um eine vektorielle Gleichung. Man hat also drei Differentialgleichungen, für jede Raumrichtung eine, zu lösen. Diese drei Differentialgleichungen sind zudem gekoppelt, so daß sie gleichzeitig gelöst werden müssen. Dies geschieht mit dem sogenannten Heun-Verfahren, einem Prädiktor-Korrektor-Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen erster Ordnung ¹. Bei diesem Verfahren wird zunächst der

¹An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, daß das Euler-Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen zu falschen Ergebnissen führt, da dieses Verfahren gegen die Itô-Lösung der stochastischen Differentialgleichung konvergiert und nicht gegen die physikalisch richtige Stratonovich-Lösung. Das Heun-Verfahren hingegen konvergiert gegen die Stratonovich-Lösung. Für eine genauere Diskussion des Itô-Stratonovich-Dilemmas siehe [59–61].

sogenannte Prädiktor

$$\bar{S}_{n+1,i}^{(\eta)} = S_{n,i}^{(\eta)} + f_i^{(\eta)}(\mathbf{S}_{n,i}, \mathbf{H}_{n,i}, t_n) \Delta t + g_i^{(\eta)}(S_{n,i}^{(\eta)}, t_n) \xi_{n,i}^{(\eta)} \quad (5.1)$$

mit $\eta \in \{x, y, z\}$, berechnet. Dabei ist die Zeit vorher diskretisiert worden,

$$t_n = n \Delta t, \quad S_{n,i}^{(\eta)} = S_i^{(\eta)}(t_n) .$$

Der Zeitschritt Δt ist dabei so klein zu wählen, daß er wesentlich kleiner ist als die Relaxationszeit der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung

$$\tau_{relax} = (\alpha + \alpha^{-1}) \gamma B \quad (5.2)$$

ist. B ist dabei ein äußeres Magnetfeld.

Im zweiten Schritt wird der neue Spinvektor $\mathbf{S}_{n+1,i} = \mathbf{S}_i(t + \Delta t)$ im sogenannten Korrektor-Schritt berechnet

$$\begin{aligned} S_{n,i}^{(\eta)} = S_{n,i}^{(\eta)} &+ \frac{1}{2} \left[f_i^{(\eta)}(\mathbf{S}_{n,i}, \mathbf{H}_{n,i}, t_n) + f_i^{(\eta)}(\bar{\mathbf{S}}_{n,i}, \bar{\mathbf{H}}_{n,i}, t_n) \right] \Delta t \\ &+ \frac{1}{2} \left[g_i^{(\eta)}(\mathbf{S}_{n,i}, t_n) + g_i^{(\eta)}(\bar{\mathbf{S}}_{n,i}, t_n) \right] \xi_{n,i}^{(\eta)} . \end{aligned} \quad (5.3)$$

Man beachte, daß $\bar{\mathbf{H}}_{n,i} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{\mathbf{S}}_{n,i}}$ mit der Konfiguration des Zwischenschritts, während $\mathbf{H}_{n,i} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_{n,i}}$ mit der alten Spinkonfiguration gebildet wird.

An dieser Stelle soll noch kurz etwas zur Erzeugung der Zufallszahlen gesagt werden. Bei dem Rauschen handelt es sich um ein weißes Rauschen mit einer Gaußverteilung. Dazu werden zunächst zwei Zufallszahlen χ_1 und $\chi_2 \in [0, 1]$ mittels eines konventionellen Zufallsgenerators erzeugt. Die gaußverteilte Zufallszahl ergibt sich dann aus

$$\xi = \sigma \sqrt{-2 \ln(1 - \chi_1)} \cos(2\pi \sigma \mu \chi_2) , \quad (5.4)$$

wobei $\sigma = 2 \frac{\alpha \mu_s}{\gamma} k_B T \Delta t$ die Breite der Gaußverteilung $P(\xi) \sim \exp\left(-\frac{\xi^2}{2\sigma^2}\right)$ darstellt.

5.2 Der heat bath Monte Carlo Algorithmus mit quantifiziertem Zeitschritt

Monte Carlo Simulationen stellen ein wichtiges Hilfsmittel in der theoretischen Physik dar. Ein großes Problem ist aber die Abbildung der Zeitskala der Monte Carlo Simulationen auf realistische Zeitskalen. Der *heat bath* Monte Carlo Algorithmus stellt eine Möglichkeit der Realisierung einer Monte Carlo Simulation dar, wobei es unter Verwendung des quantifizierten Zeitschritts möglich ist, die quasi-Zeitskala der Monte Carlo Simulation auf realistische Zeitintervalle abzubilden.

Monte Carlo Simulationen berechnen näherungsweise Trajektorien im Phasenraum basierend auf der Master-Gleichung

$$\frac{dP_S(t)}{dt} = \sum_{S'} (P_{S'}(t)W_{S' \rightarrow S} - P_S(t)W_{S \rightarrow S'}) \quad , \quad (5.5)$$

welche die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_S(t)$ im Phasenraum beschreibt. S und S' sind hierbei zwei Zustände, $P_S(t)$ ist die Wahrscheinlichkeit, daß sich das System im Zustand S befindet und $W_{S \rightarrow S'}$ ist die Übergangsrate vom Zustand S in den Zustand S' . Die *heat bath* Wahrscheinlichkeit

$$W_{S \rightarrow S'} = \frac{w_0}{1 + \exp \frac{E(S') - E(S)}{k_B T}} \quad (5.6)$$

ist dabei eine Möglichkeit die Mastergleichung zu erfüllen, wobei die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht

$$P_{S'}(t)W_{S' \rightarrow S} = P_S(t)W_{S \rightarrow S'} \quad (5.7)$$

ebenfalls erfüllt ist.

Mit der Master-Gleichung wird dabei eine Ankopplung des Systems an ein Wärmebad beschrieben, wobei nur die reversiblen Anteile der Dynamik (Relaxation, Fluktuation) beschrieben werden. Der Präzessionsanteil wird im Gegensatz zur Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung nicht berücksichtigt. Trotzdem ist es möglich dynamische Prozesse zu simulieren, wobei man sich dem Fehlen der Präzession bewußt sein sollte.

Das Vorgehen bei der Monte Carlo Simulation ist das folgende: Man beginnt damit, daß man ein Spin \mathbf{S} zufällig auswählt und dessen Richtung probeweise variiert. Auf diese Weise erhält man einen Versuchsspin \mathbf{S}' . Nun wird die Energiedifferenz $\Delta E = E(S') - E(S)$ zwischen dem ursprünglichen Spin und dem Versuchsspin berechnet. Anschließend wird der Versuchsschritt mit der *heat bath* Wahrscheinlichkeit, in welche die Energiedifferenz ΔE eingeht, akzeptiert. Im Fall einer Nichtakzeptanz verharrt der Spin im Zustand \mathbf{S} , andernfalls wird der Zustand \mathbf{S}' angenommen. Anschließend wird zufällig der nächste Spin ausgewählt und das Verfahren wiederholt. Führt man die obige Prozedur im Mittel einmal für jeden Spin durch, so erhält man einen Monte Carlo Schritt (MCS), welcher die Zeitskala des Systems beschreibt. Die Verbindung zu realistischen Zeitskalen ist hierbei ein Problem, welches nur in einigen wenigen Fällen gelöst ist. Eine Möglichkeit ist die Abbildung der Zeitskala der Monte Carlo Simulation auf die Zeitskala der Langevin-Dynamik mit Hilfe eines sogenannten quantifizierten Zeitschritts.

Auf eine genaue Herleitung bzw. Diskussion soll an dieser Stelle verzichtet und auf die Literatur zu diesem Thema [62, 63] verwiesen werden. Die Realisierung hängt letztendlich von der Umsetzung des *single flip* Algorithmus, also wie der Versuchsspin \mathbf{S}' erzeugt wird, ab. Dazu wird zunächst ein zufälliger Vektor mit einer konstanten Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb einer Kugel mit dem Radius R mittels

der Verwerfungsmethode [64] konstruiert. Dieser Vektor wird zu dem ursprünglichen Vektor, welcher den Anfangszustand \mathbf{S} beschreibt, hinzuaddiert, und anschließend wird der so gewonnene Versuchspin normiert. Dieser befindet sich dann innerhalb eines Kegels um den ursprünglichen Spin, dessen Öffnungswinkel von R bestimmt wird. Bei dieser Art Versuchsschritt ist jeder Spin nur in der Lage eine kleine Bewegung auszuführen.

Der Zusammenhang zwischen dem Radius R des Versuchsschrittes und dem Zeitintervall Δt für die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung ist dann gegeben durch

$$R^2 = \frac{20k_B T \alpha \gamma}{(1 + \alpha^2) \mu_s} \Delta t \quad , \quad (5.8)$$

wobei zu beachten ist, daß einem Monte Carlo Schritt (MCS) das Zeitintervall Δt entspricht. Allerdings gilt dies nur im Fall großer Dämpfungen α . In diesem Fall verschwindet bei der Langevin-Dynamik ebenfalls die Präzession, so daß Langevin-Dynamik und Monte Carlo Simulation vergleichbar sind.

Zur Wahl des Radius R ist anzumerken, daß dieser nicht zu groß gewählt werden darf, da sonst der Zusammenhang zwischen der Zeitskala Δt und einem Monte Carlo Schritt nicht mehr gegeben ist. Eine zu kleine Wahl von R hingegen bedeutet eine zu lange Rechenzeit, so daß man im allgemeinen den Radius R über die Relation Gl. 5.8 nach Vorgabe des Zeitschrittes Δt berechnet.

5.3 Die lokale Molekularfeldnäherung

Die Molekularfeldnäherung wurde bereits in Kapitel 4 behandelt. Es handelt sich dabei um eine Methode mit der es möglich ist, die Gleichgewichtsthermodynamik des Heisenberg Modells zu berechnen. Im allgemeinen wird man aber nicht nur die isotrope Hamiltonfunktion Gl. 4.3 betrachten, sondern diese erweitern, so daß z.B. ein äußeres Feld, Anisotropien und die Dipol-Dipol Wechselwirkung berücksichtigt werden. Die zugehörige Hamiltonfunktion ist dann gegeben durch

$$\mathcal{H}_{\text{MF}}^- = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{m}_j - D \sum_i (S_i^z)^2 - \mu_B \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i - \omega \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{dip.}} \quad , \quad (5.9)$$

wobei alle Summanden welche die dynamische Variable \mathbf{S}_i nicht enthalten weggelassen wurden, da sie später bei der Mittelwertbildung Gl. 4.6 sowieso negiert werden. Das Dipolfeld $\mathbf{H}_i^{\text{dip.}}$ ist dabei gegeben durch

$$\mathbf{H}_i^{\text{dip.}} = \sum_{j \neq i} \frac{3(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{m}_j) \mathbf{e}_{ij} - \mathbf{m}_j}{r_{ij}^3} \quad (5.10)$$

und $\omega = \frac{\mu_0 \mu_s}{4\pi a^3}$.

Um nun den thermischen Mittelwert \mathbf{m}_i berechnen zu können ist es hilfreich zu

Polarkoordinaten überzugehen

$$\mathbf{S}_i = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix},$$

wobei dann die Spurbildung in Gl. 4.6 durch eine Integration über die Einheitskugel

$$\text{Sp} \rightarrow \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta$$

ersetzt werden kann. Die Integration selbst wurde numerisch mittels eines Gauß-Legendre Verfahrens durchgeführt (Siehe Anhang).

5.4 Die Methode der Greenfunktionen mit RPA-Entkopplung

Im Gegensatz zu den bisher besprochenen Simulationen und Rechnungen stellt die hier verwendete Methode der Greenfunktionen eine quantenmechanische Rechnung dar, mit der es möglich ist, die Thermodynamik des quantenmechanischen Heisenberg Modells zu betrachten.

Ausgangspunkt sei die retardierte Vielteilchen Greenfunktion nach Zubarev [65]

$$G_{lm,\eta}(t-t') = \langle \langle \hat{A}_l; \hat{B}_m \rangle \rangle_\eta = -i\Theta(t-t') \langle \langle [\hat{A}_l, \hat{B}_m]_\eta \rangle \rangle \quad (5.11)$$

mit $\eta = \pm 1$. η gibt dabei an ob die Operatoren \hat{A}_l und \hat{B}_m fermionisches ($\eta = +1$) oder bosonisches ($\eta = -1$) Verhalten bzgl. den Kommutatorrelationen zeigen. $\Theta(t-t')$ ist hierbei die Stufenfunktion und $\langle \langle [\hat{A}_l, \hat{B}_m]_\eta \rangle \rangle$ ist die themodynamische Mittelung der Kommutatorrelation

$$[\hat{A}_l, \hat{B}_m]_\eta = \hat{A}_l \hat{B}_m + \eta \hat{B}_m \hat{A}_l, \quad \eta = \pm 1 \quad (5.12)$$

Aus der Heisenberg'schen Bewegungsgleichung nach Fouriertransformation in den Energieraum ergibt sich die folgende Bewegungsgleichung

$$\omega \langle \langle \hat{A}_l; \hat{B}_m \rangle \rangle_{\eta,\omega} = \langle \langle [\hat{A}_l, \hat{B}_m]_\eta \rangle \rangle + \langle \langle [\hat{A}_l, \hat{\mathcal{H}}]_\eta; \hat{B}_m \rangle \rangle_{\eta,\omega}. \quad (5.13)$$

Mit Hilfe der Fouriertransformation in den \mathbf{k} -Raum

$$g(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{l,m} G_{lm}(\omega) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{m})} \quad (5.14)$$

läßt sich die Korrelationsfunktion

$$\langle \hat{B}_m \hat{A}_l \rangle = \frac{1}{N} \sum_k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{m})} C_k \quad (5.15)$$

angeben. Die C_k werden dabei mit Hilfe des Spektraltheorems

$$C_k = \frac{i}{2\pi} \int \frac{d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} + \eta} \left[g(\mathbf{k}, \omega + i\sigma^+) - g(\mathbf{k}, \omega - i\sigma^+) \right] \quad (5.16)$$

berechnet. $i\sigma^+$ ist dabei eine infinitesimale Verschiebung, da das Integral auf der reellen Achse nicht regulär ist.

Betrachtet man nun den Fall der Spinquantenzahl $S = 1/2$ so erweist es sich als zweckmäßig für $\hat{A}_l = \hat{S}_l^+$ und $\hat{B}_m = \hat{S}_m^-$ zu verwenden. Im Allgemeinen wird man $\hat{A}_l = \hat{S}_l^+$ und $\hat{B}_m = (\hat{S}_m^z)^n \hat{S}_m^-$ verwenden müssen um $2S$ Gleichungen zu erhalten [50]. Dabei ist $n = 0 \dots 2S - 1$ zu wählen.

Der Hamiltonoperator des quantenmechanischen Heisenberg Modells mit Austauschwechselwirkung, Ein- bzw. Zweiionenanisotropie und äußerem Feld ist gegeben durch

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{i,j} \frac{\hat{J}_{ij}}{2} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - D^{(1)} \sum_i (\hat{S}_i^z)^2 - \sum_{i,j} \frac{D_{ij}^{(2)}}{2} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - g\mu_B B_z \sum_i \hat{S}_i^z \quad (5.17)$$

Man beachte, daß sowohl die Spinoperatoren, als auch die Wechselwirkungskonstanten dimensionsbehaftet sind. An dieser Stelle erweist es sich als sinnvoll, zu dimensionslosen normierten Spinoperatoren überzugehen:

$$\mathcal{S}_i = \frac{\hat{\mathbf{S}}_i}{\hbar S} \quad (5.18)$$

Dies hat den Vorteil, daß jetzt die Wechselwirkungskonstanten die Dimension einer Energie haben. Damit läßt sich der Hamiltonoperator Gl. 5.17 schreiben als

$$\tilde{\mathcal{H}} = - \sum_{i,j} \frac{j_{ij}}{2} \mathcal{S}_i \cdot \mathcal{S}_j - d^{(1)} \sum_i (\mathcal{S}_i^z)^2 - \sum_{i,j} \frac{d_{ij}^{(2)}}{2} \mathcal{S}_i^z \mathcal{S}_j^z - b \sum_i \mathcal{S}_i^z \quad (5.19)$$

mit $j_{ij} = \hbar^2 S^2 \hat{J}_{ij}$, $d^{(1)} = \hbar^2 S^2 D^{(1)}$, $d_{ij}^{(2)} = \hbar^2 S^2 D_{ij}^{(2)}$ und $b = g\mu_B B_z \hbar S$.

Die Bewegungsgleichung für die Greenfunktion läßt sich dann mit Hilfe der Kommutatorrelationen $[\mathcal{S}_i^+, \mathcal{S}_j^-]_- = \mathcal{S}_i^z \delta_{ij}$ und $[\mathcal{S}_i^+, \mathcal{S}_j^z]_- = -\mathcal{S}_i^+ \delta_{ij}$ schreiben als

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} G_{l,m}^{(n)}(t-t') &= \hbar \left\langle \left[\mathcal{S}_l^+(t), (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right]_- \right\rangle \delta(t-t') \\ &+ \sum_i j_{il} \left\langle \left\langle \mathcal{S}_l^+(t) \mathcal{S}_i^z(t); (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right\rangle \right\rangle \\ &- \sum_i j_{il} \left\langle \left\langle \mathcal{S}_i^+(t) \mathcal{S}_l^z(t); (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right\rangle \right\rangle \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned}
 & + d^{(1)} \left\langle \left\langle \mathcal{S}_l^+(t) \mathcal{S}_l^z(t) + \mathcal{S}_l^z(t) \mathcal{S}_l^+(t); (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right\rangle \right\rangle \\
 & + \sum_i d_{il}^{(2)} \left\langle \left\langle \mathcal{S}_i^+(t) \mathcal{S}_i^z(t); (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right\rangle \right\rangle \\
 & + b G_{l,m}^{(n)}(t-t')
 \end{aligned}$$

Die Bewegungsgleichung enthält Greenfunktionen höherer Ordnung, für welche sich ebenfalls Bewegungsgleichungen mit Greenfunktionen noch höherer Ordnung angeben lassen. Es ergibt sich somit ein System von unendlich vielen Differentialgleichungen. Um ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten, müssen die Greenfunktionen entkoppelt werden. Dies geschieht häufig mittels der RPA- (*random phase approximation*) oder Tyablikov-Entkopplung [50, 66]

$$\begin{aligned}
 \left\langle \left\langle \mathcal{S}_l^+(t) \mathcal{S}_l^z(t); (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right\rangle \right\rangle & \rightarrow \langle \mathcal{S}_i^z(t) \rangle G_{lm}^{(n)}(t-t') \\
 \left\langle \left\langle \mathcal{S}_i^+(t) \mathcal{S}_i^z(t); (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right\rangle \right\rangle & \rightarrow \langle \mathcal{S}_i^z(t) \rangle G_{im}^{(n)}(t-t') .
 \end{aligned}$$

Entkoppelt man auf diese Weise die Greenfunktion der Einionenanisotropie so erhält man unphysikalische Ergebnisse. Deshalb wird hier ein anderes Entkopplungsverfahren verwendet, die Callen-Anderson-Entkopplung

$$\left\langle \left\langle \mathcal{S}_l^+(t) \mathcal{S}_l^z(t) + \mathcal{S}_l^z(t) \mathcal{S}_l^+(t); (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right\rangle \right\rangle \rightarrow \Phi^+ G_{l,m}^{(n)}(t-t')$$

mit

$$\Phi^+ = 2 \langle \mathcal{S}_i^z \rangle \left(1 - \frac{1}{2S^2} [S(S+1) - S^2 \langle (\mathcal{S}_i^z)^2 \rangle] \right)$$

Damit ergibt sich für die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} G_{l,m}^{(n)}(t-t') & = \hbar A \delta(t-t') \\
 & + \sum_i j_{il} \left[\langle \mathcal{S}_l^z(t) \rangle G_{im}^{(n)}(t-t') - \langle \mathcal{S}_i^z(t) \rangle G_{lm}^{(n)}(t-t') \right] \\
 & + d^{(1)} \Phi^+ G_{l,m}^{(n)}(t-t') + \sum_i d_{il}^{(2)} \langle \mathcal{S}_i^z(t) \rangle G_{lm}^{(n)}(t-t') \\
 & + b G_{l,m}^{(n)}(t-t')
 \end{aligned} \tag{5.21}$$

mit

$$A = \left\langle \left[\mathcal{S}_l^+(t), (\mathcal{S}_m^z(t'))^n \mathcal{S}_m^-(t') \right]_- \right\rangle .$$

Nach der Fouriertransformation in den \mathbf{k} -Raum bzw. in den Energieraum

$$G_{lm}^{(n)}(t-t') = \frac{1}{\pi^3} \int d\mathbf{k} \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega(t-t')} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{lm}} G^{(n)}(\omega, \mathbf{k}) \tag{5.22}$$

ergibt sich die Greenfunktion $G(\omega, \mathbf{k})$ zu

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{A(\mathbf{k})}{\hbar\omega - E(\mathbf{k})} , \quad (5.23)$$

mit der Energie

$$E(\mathbf{k}) = \langle \mathcal{S}_z \rangle [J(0) + D(0) - J(\mathbf{k})] + d^{(1)}\Phi^+ + b . \quad (5.24)$$

Hierbei ist

$$J(0) = \sum_i j_{il} , \quad D(0) = \sum_i d_{il}^{(2)} \quad (5.25)$$

und

$$J(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{lm} j_{lm} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{lm}} . \quad (5.26)$$

Für die weitere Betrachtung soll nun wieder zu den dimensionsbehafteten Spinoperatoren $\hat{\mathbf{S}}_i$ übergegangen werden. Man beachte, daß damit $\langle \hat{S}^z \rangle$ die Dimension $\hbar S$ und $\langle (\hat{S}^z)^2 \rangle$ die Dimension $\hbar^2 S^2$ hat. Weiterhin hat die Austauschwechselwirkungskonstante J die Dimension $\frac{1}{\hbar s}$, s ist dabei die Zeit. Somit ist aber die Temperatur $\frac{k_B T}{J}$ nicht mehr dimensionslos, sondern hat die Dimension $\hbar^2 S^2$. Da im weiteren mit diesen dimensionsbehafteten Spinoperatoren gerechnet werden soll, muß dies bei der Auswertung beachtet und entsprechend korrigiert werden.

Die Magnetisierung ergibt sich nun aus dem Spektraltheorem Gl. 5.16 [50] unter Verwendung der folgenden der aus Quantenmechanik bekannten Relation

$$\langle \hat{S}_i^+ \hat{S}_i^- \rangle = \hbar^2 S(S+1) + \hbar \langle \hat{S}_i^z \rangle - \langle (\hat{S}_i^z)^2 \rangle . \quad (5.27)$$

Nach einer etwas längeren Rechnung erhält man folgende Selbstkonsistenzgleichung für die Magnetisierung [50]

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \hbar \frac{[S - \varphi(S)][1 + \varphi(S)]^{2S+1} + [1 + S + \varphi(S)][\varphi(S)]^{2S+1}}{[1 + \varphi(S)]^{2S+1} - [\varphi(S)]^{2S+1}} , \quad (5.28)$$

mit

$$\varphi(S) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\frac{E(\mathbf{k})}{k_B T}} - 1} , \quad (5.29)$$

wobei im Allgemeinen die Summation über \mathbf{k} durch eine Integration über die 1. Brillouinzone ersetzt wird: $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k}$.

Man beachte daß in $E(\mathbf{k})$ $\langle \hat{S}^z \rangle$ und $\langle (\hat{S}_i^z)^2 \rangle$ eingeht. Man benötigt somit noch eine

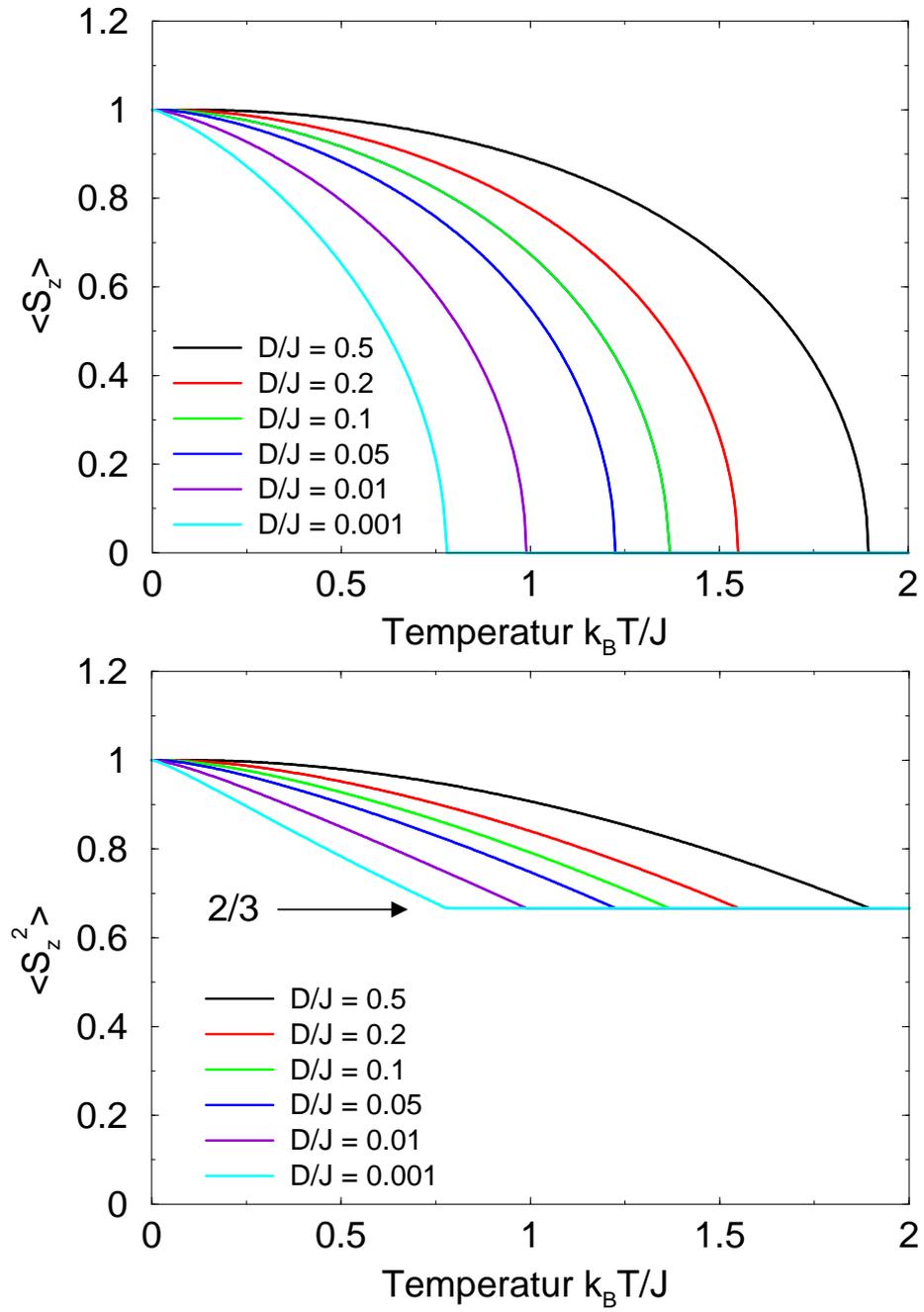


Abbildung 5.1: Magnetisierung $\langle \hat{S}^z \rangle$ und Korrelationsfunktion $\langle (\hat{S}^z)^2 \rangle$ eines 2D Films mit $J = 100$ und unterschiedliche Anisotropien D/J .

Relation für $\langle (\hat{S}_i^z)^2 \rangle$, bei welcher es sich ebenfalls um eine Selbstkonsistenzgleichung handelt, welche parallel zu Gl. 5.28 berechnet werden muß

$$\begin{aligned} \langle (\hat{S}_i^z)^2 \rangle = \hbar^2 \left(S^2 + \varphi(S) - 2S\varphi(S) + 2\varphi(S)^2 \right. \\ \left. + \frac{(1 + 2S) \varphi(S)^{2S+1} (1 + 2\varphi(S))}{\varphi(S)^{2S+1} - (1 + \varphi(S))^{2S+1}} \right). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Die Rechnung besteht nun darin, die Gleichungen Gl. 5.28 und Gl. 5.30 selbstkonsistent zu lösen, wobei jeweils das Integral Gl. 5.29 mit berechnet werden muß. Die Integration geschieht dabei mittels des Gauß-Legendre Quadraturverfahrens (Siehe Anhang A.3). Die Selbstkonsistenzgleichungen lassen sich umformulieren zu einer Nullstellensuche, für die das Sekantenverfahren verwendet wird.

Als Test wurde die Magnetisierung $\langle \hat{S}_i^z \rangle$ sowie die Korrelationsfunktion $\langle (\hat{S}_i^z)^2 \rangle$ eines zweidimensionalen Films mit Spinquantenzahl $S = 1$, mit der Austauschwechselwirkung $J = 100$ und einer Einionenanisotropie $D^{(1)} = 0.001 \dots 0.5$ berechnet (Abb. 5.1). Die Werte sind aus der Publikation "*Field-induced magnetic reorientation and effective anisotropy of a ferromagnetic monolayer within spin wave theory*" von P. Fröbrich, P.J. Jensen und P. J. Kuntz [67] (Seite 488) entnommen. Die Abb. 5.1 stimmt mit der Fig. 9 in der oben genannten Publikation überein, so daß von der Richtigkeit des Programms ausgehen kann.

Man beachte, daß bei Abb. 5.1 die Temperatur nicht dimensionslos ist, sondern die Dimension $\hbar^2 S^2$ hat. $\langle \hat{S}^z \rangle$ und $\langle (\hat{S}^z)^2 \rangle$ haben die Dimension $\hbar S$ bzw. $\hbar^2 S^2$. Dies ergibt sich aus der Tatsache, daß bei Fröbrich et al. mit den dimensionsbehafteten Spinoperatoren gerechnet wurde, anstatt zu dimensionslosen Größen überzugehen.

6 Domänenwände in Nanodrähten

In ferromagnetischen Materialien sind im Grundzustand die magnetischen Momente alle gleich ausgerichtet. Kerrmikroskopische Aufnahmen zeigen [31], daß sich diese Fernordnung nicht über den gesamten Festkörper erstreckt, sondern dieser in Bereiche gleicher Magnetisierung zerfällt. Diese Bereiche werden als magnetische Domänen oder Weiß'sche Bezirke bezeichnet. Die Ursache für die Ausbildung solcher Domänen ist in der Dipol-Dipol-Wechselwirkung, sowie in weiteren Effekten wie der Anisotropie zu suchen. Durch die Bildung der Domänen wird dabei die Energie des Systems abgesenkt.

Der Bereich zwischen den Domänen, in dem sich die Orientierung der magnetischen Momente ändert, wird Domänenwand genannt. Man unterscheidet verschiedene Arten von Domänenwänden, wobei ein Kriterium dabei der Winkel ist, um welchen die Magnetisierungsrichtung in der Domänenwand geändert wird. Diese Arbeit beschränkt sich im wesentlichen auf 180° -Domänenwände, welche zwischen zwei Domänen entgegengesetzter Orientierung zu finden sind.

In eindimensionalen Systemen unterscheidet man dabei im wesentlichen zwischen zwei Arten von 180° -Domänenwänden. Die Charakterisierung erfolgt hierbei durch die Einführung einer Ebene, welche durch die Spinkette und durch die Achsenrichtung, in welche die magnetischen Momente in den Domänen orientiert sind, gegeben ist. Zeigen die magnetischen Momente in der Domänenwand aus dieser Ebene heraus, wobei ein magnetisches Moment genau in der Mitte der Domänenwand senkrecht auf dieser Ebene steht, so spricht man von einer Blochwand. Sind hingegen alle magnetischen Momente in der Ebene orientiert, einschließlich der magnetischen Momente in der Domänenwand, so spricht man von einer Néelwand (Abb. 6.1). Man führt nun im allgemeinen einen Winkel ϕ ein, welcher diese

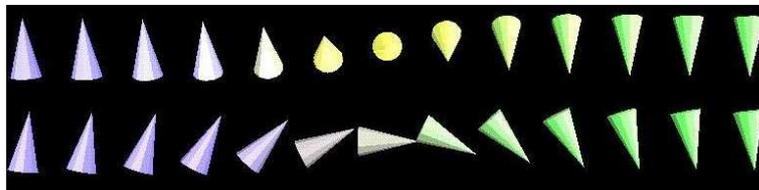


Abbildung 6.1: Lineare Kette mit Bloch-Wand (oben) bzw. Néel-Wand (unten).

Charakterisierung beschreibt. Je nach Definition liegt bei $\phi = 0^\circ$ oder 90° eine

Blochwand oder Néelwand vor. Allerdings treten auch 180° -Domänenwände auf, bei denen der Winkel ϕ nicht 0° oder 90° ist.

Bei zweidimensionalen Systemen unterscheidet man ebenfalls zwischen Bloch- und Néelwänden, wobei hier die Bezugsebene durch das System selbst gegeben ist. Bei dreidimensionalen Systemen läßt sich im allgemeinen aufgrund der Symmetrie eine solche Bezugsebene nicht mehr definieren, so daß man hier ganz allgemein von einer transversalen Domänenwand spricht. Dieser Begriff soll im weiteren allgemein gebraucht werden. Das schließt die Spezialfälle Bloch- und Néelwand mit ein.

Im nächsten Abschnitt soll die Wandform und die Wandenergie einer transversalen Domänenwand berechnet werden. Diese Rechnungen werden ganz allgemein durchgeführt und es wird sich dabei zeigen, daß sowohl die Wandform, als auch die Energie der Domänenwand unabhängig vom Winkel ϕ ist.

6.1 Domänenwände: Wandform und Energie

Die Energie einer linearen Spinkette mit Energiebeiträgen der Austauschwechselwirkung und der Kristallanisotropie ist in mikromagnetischer Näherung und in Polarkoordinaten gegeben durch

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ A \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\cos \theta \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right] + K \cos^2 \theta \right\} dx . \quad (6.1)$$

Die Kette erstreckt sich dabei längs der x -Achse und die magnetischen Momente in den Domänen sind ins $\pm z$ -Richtung orientiert.

Der erste Term in Gl. 6.1 ist der Energiebeitrag der Austauschwechselwirkung mit der Austauschkonstante A . Der zweite Term ist der Energiebeitrag von der Kristallanisotropie mit der Anisotropiekonstanten K . Der Winkel θ ist dabei der Winkel bzgl. der z -Achse ($-\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$) und der Winkel ϕ ist bzgl. der x -Achse gewählt.

Mittels Variationsrechnung läßt sich für gegebene Randbedingungen die optimale Einstellung der Funktionen $\theta(x)$ und $\phi(x)$ finden. Dies bedeutet, daß die Euler-Lagrange Gleichungen $\frac{\delta E}{\delta \theta} = \frac{\delta E}{\delta \phi} = 0$ sein müssen. Dies führt zu den Differentialgleichungen

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \cos^2 \theta - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \sin 2\theta = 0 \quad (6.2)$$

und

$$2A \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) + \left[K + A \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right] \sin 2\theta = 0 \quad (6.3)$$

Eine Lösung der Gl. 6.2 ist $\phi = \text{const.}$. Dies entspricht den bereits im vorherigen Abschnitt gemachten Überlegungen. Damit ergibt sich $\frac{\partial\phi}{\partial x} = 0$, und somit für die Gl. 6.3

$$2A \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} \right) = -2K \sin\theta \cos\theta \quad (6.4)$$

Diese Differentialgleichung läßt sich nach Erweitern beider Seiten mit $\frac{\partial\theta}{\partial x}$ aufintegrieren und man erhält

$$A \left(\frac{\partial\theta}{\partial x} \right)^2 = -K \sin^2\theta + C \quad (6.5)$$

Die Integrationskonstante C ergibt sich hierbei aus der Randbedingung für $\frac{\partial\theta}{\partial x}$ im Unendlichen. Mit $\Delta = \sqrt{\frac{A}{K}}$ und $k = \sqrt{\frac{K}{C}}$ ergibt sich

$$\Delta k \frac{\partial\theta}{\partial x} = \sqrt{1 - k^2 \sin^2\theta} \quad (6.6)$$

Diese Differentialgleichung läßt sich durch Trennung der Variablen lösen

$$\Delta k \int_0^{\vartheta} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2\theta}} = \int_0^x dx \quad (6.7)$$

Als Lösung ergibt sich

$$x = \Delta k F(k, \vartheta) \quad (6.8)$$

wobei es sich bei $F(k, \vartheta)$ um ein elliptisches Integral erster Ordnung handelt. Damit ergeben sich für die Spinkomponenten folgende Relationen [68]:

$$S_z = \sin\vartheta = \text{sn} \left(\frac{x}{k\Delta}, k \right) \quad (6.9)$$

$$S_x = \cos\vartheta = \text{cn} \left(\frac{x}{k\Delta}, k \right) \quad (6.10)$$

Dabei handelt es sich bei sn und cn um den Jacobi-Sinus bzw. um den Jacobi-Kosinus.

Betrachtet man nun den Fall, daß $\frac{\partial\theta}{\partial x}$ im Unendlichen Null ist, also $C = K \Leftrightarrow k \equiv 1$ dann ergeben sich die bekannten Lösungen für das Domänenwandprofil der transversalen Domänenwand

$$S_z = \text{sn} \left(\frac{x}{\Delta}, 1 \right) = \pm \tanh \left(\frac{x}{\Delta} \right) \quad (6.11)$$

$$S_x = \text{cn} \left(\frac{x}{\Delta}, 1 \right) = \text{sech} \left(\frac{x}{\Delta} \right) \quad (6.12)$$

Berücksichtigt man noch den Winkel ϕ so ergibt sich ganz allgemein

$$\mathbf{S}(x) = \frac{\cos \phi}{\cosh\left(\frac{x}{\Delta}\right)} \mathbf{e}_x + \frac{\sin \phi}{\cosh\left(\frac{x}{\Delta}\right)} \mathbf{e}_y \pm \tanh\left(\frac{x}{\Delta}\right) \mathbf{e}_z . \quad (6.13)$$

Betrachtet man den Ausdruck für die Energie Gl. 6.1 und substituiert $\frac{\partial \theta}{\partial x}$ und dx durch Ausdrücke, die sich aus Gl. 6.6 ergeben, so erhält man

$$\begin{aligned} E &= \sqrt{AK} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \left[\frac{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}{k} + \frac{k \cos^2 \theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} \right] d\theta \\ &= \sqrt{AK} \left[\frac{2}{k} E(k) + \frac{k^2 - 1}{k} F(k) \right] , \end{aligned} \quad (6.14)$$

wobei es sich bei $E(k) = E\left(k, \frac{\pi}{2}\right)$ um ein elliptisches Integral 2. Art und $F(k) = F\left(k, \frac{\pi}{2}\right)$ um ein elliptisches Integral 1. Art handelt. Im Grenzfall $k = 1$ ergibt sich die Wandenergie

$$E = 2\sqrt{AK} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos \theta d\theta = 4\sqrt{AK} . \quad (6.15)$$

Abb. 6.2 zeigt den Vergleich der numerisch durch Lösen der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung gewonnenen Energien mit der analytischen Lösung im Fall einer ausgedehnten transversalen Domänenwand ($k = 1$). Hierbei ist zu beachten, daß in der analytischen Rechnung die mikromagnetische Notation verwendet wurde, die numerischen Rechnungen, sowie bei der Auftragung, aber die Notation des diskreten Heisenberg Modells verwendet wurden. Die Umrechnung sei an dieser Stelle noch einmal angegeben. Die Anisotropie ist dabei durch $D = Ka^3$ und die Austauschkonstante durch $J = 2Aa$ umzurechnen, wobei a die Gitterkonstante ist.

Interessant ist nun ein genauerer Vergleich der Kontinuumsnäherung mit der diskreten numerischen Rechnung. Abb. 6.3 zeigt das tanh-Profil einer transversalen Domänenwand für verschiedene Anisotropie zu Austausch $\frac{D}{J}$ Verhältnisse. Man erkennt, daß mit zunehmender Anisotropie die Domänenwandbreite kleiner wird, was auch zu erwarten ist, wird dadurch die Energie immer stärker minimiert. Allerdings ist auch eine immer stärkere Abweichung der analytischen von der numerischen Lösung zu erkennen. Diese Abweichungen lassen sich mit dem Versagen der mikromagnetischen Näherung begründen sobald man mit der Domänenwandbreite in die Nähe der Gitterkonstante kommt. In diesem Fall ist die Bedingung der nur langsamen Änderung der magnetischen Momente nicht mehr gegeben, was letztlich zu dem Versagen führt.

Die gleiche Bedingung, daß sich die magnetischen Momente nur leicht ändern sollen um eine kontinuierliche Änderung der Magnetisierung zu haben, führt weiterhin zu

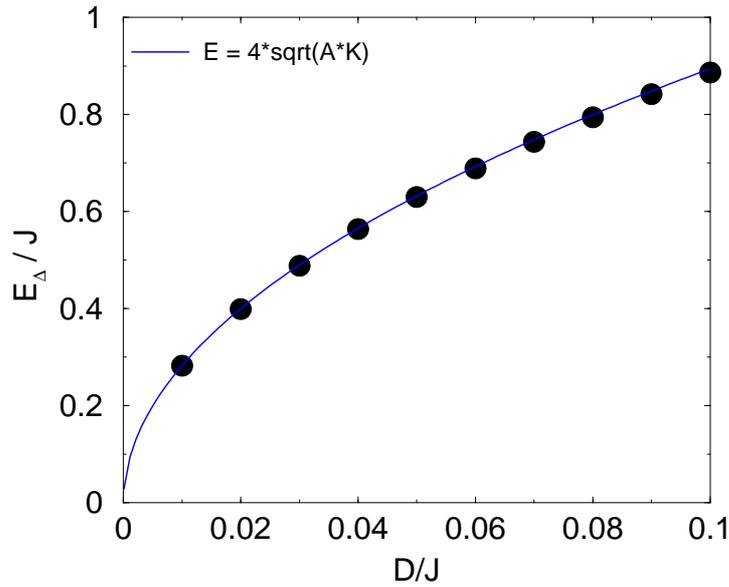


Abbildung 6.2: Wandenergie E_Δ als Funktion der Anisotropie D einer transversalen Domänenwand. Die numerisch berechneten Werte wurden mit der Gleichung Gl. 6.15 verglichen. ($D = Ka^3$, $J = 2Aa$).

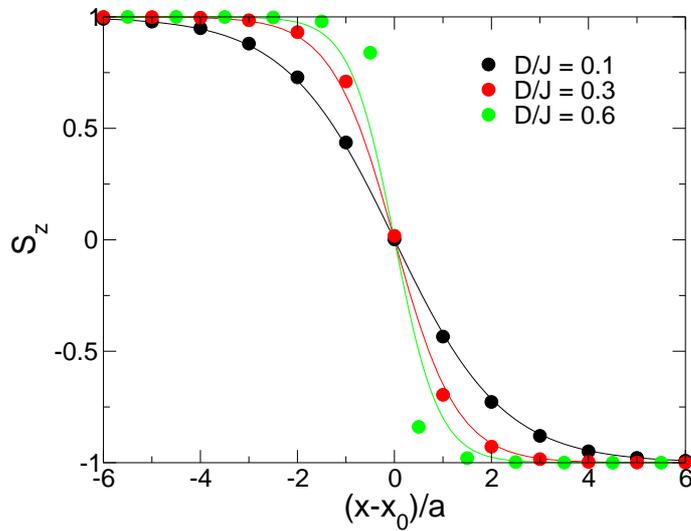


Abbildung 6.3: Abweichung der numerischen Lösung von der Kontinuumslösung (Mikromagnetismus) für große Anisotropien. Die Abweichungen nehmen um so stärker zu, je kleiner die Domänenwandbreite $\Delta = \sqrt{Ja^2/2D}$ ist. ($\omega/J = 0$).

dem Problem, daß die mikromagnetische Näherung nur bei niedrigen Temperaturen T mit den Langevin-Dynamik Simulationen des diskreten Heisenberg Modells übereinstimmen, da in diesem Bereich nur langwellige Spinwellen angeregt werden, so daß die Bedingung in diesem Temperaturbereich gesichert ist. Für höhere Temperaturen versagt dann die mikromagnetische Näherung und die Simulationen liefern falsche Ergebnisse.

6.2 Domänenwände in Nanodrähten

Es werden im Folgenden zylindrische Drähte mit einer Länge L von 256 Gitterkonstanten und einem Durchmesser d von 8 Gitterkonstanten untersucht. Ausgangspunkt der Simulationen sind Drähte mit einer isingartigen Domänenwand, also zwei abrupt aufeinanderstoßenden Domänen. Durch Ausrelaxieren, also durch selbstkonsistentes Lösen der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung Gl. 3.15 wird dieser energetisch ungünstige Zustand in einen energetisch günstigeren überführt, wobei sich ausgedehnte stetige Domänenwände bilden.

Abhängig vom Drahtdurchmesser d bzw. dem Verhältnis ω/J , welches das Verhältnis der Dipol-Dipol-Wechselwirkung zur Austauschwechselwirkung beschreibt¹, treten zwei verschiedene Domänenwandformen auf, die transversale Domänenwand, sowie die Vortexdomänenwand [4, 69–71].

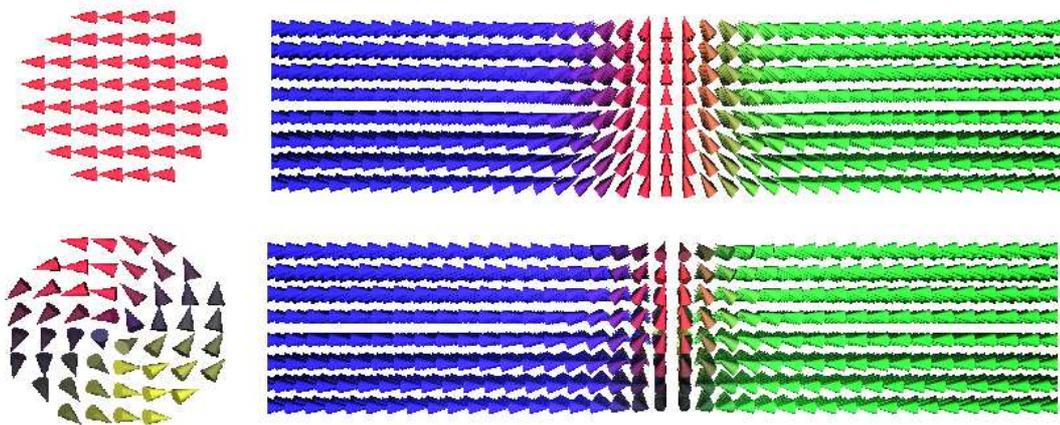


Abbildung 6.4: Transversale Domänenwand (obere Abbildung) und Vortexdomänenwand (untere Abbildung)

Die transversale Domänenwand ist dadurch charakterisiert, daß bei dieser Wand-

¹ $\omega = \mu_0 \mu_s^2 / (4\pi a^3) > 0$ ist dabei die Stärke der dipolaren Wechselwirkung und J die Austauschwechselwirkungskonstante

form alle magnetischen Momente einer Ebene senkrecht zum Draht gleich ausgerichtet, also parallel zueinander, sind. Die Wandform ist analog zu der der Bloch- bzw. Néel-Wand und läßt sich durch den gleichen analytischen Ausdruck für die Wandform beschreiben:

$$\mathbf{S}(z) = -\tanh\left(\frac{z}{\Delta}\right)\mathbf{e}_z + \frac{\cos\phi}{\cosh\left(\frac{z}{\Delta}\right)}\mathbf{e}_x + \frac{\sin\phi}{\cosh\left(\frac{z}{\Delta}\right)}\mathbf{e}_y \quad (6.16)$$

Die Domänenwandbreite Δ ist dabei gegeben durch

$$\Delta = \sqrt{\frac{Ja^2}{2D_{eff}}}, \quad (6.17)$$

mit der effektiven Anisotropie $D_{eff} = D_e + D_\omega$. Dabei sind J die Austauschwechselwirkung, a die Gitterkonstante, D_e die kristalline Anisotropie und D_ω die Formanisotropie, welche von der Dipol-Dipol-Wechselwirkung herrührt.

Die Vortexwand ist dadurch charakterisiert, daß die magnetischen Momente in der Wand einen Wirbel (engl. *vortex*) bilden. Der Wirbel entsteht durch die Konkurrenz zwischen der Austauschwechselwirkung und der Dipol-Dipol-Wechselwirkung. Während die magnetischen Momente eine Energieerniedrigung erfahren, wenn sie parallel ausgerichtet sind, aufgrund der Austauschwechselwirkung, bevorzugt die Dipol-Dipol-Wechselwirkung eine Stellung der magnetischen Momente hintereinander (siehe Abb. 6.5).

Für diese Wandform gibt es aber derzeit noch keinen analytischen Ausdruck.

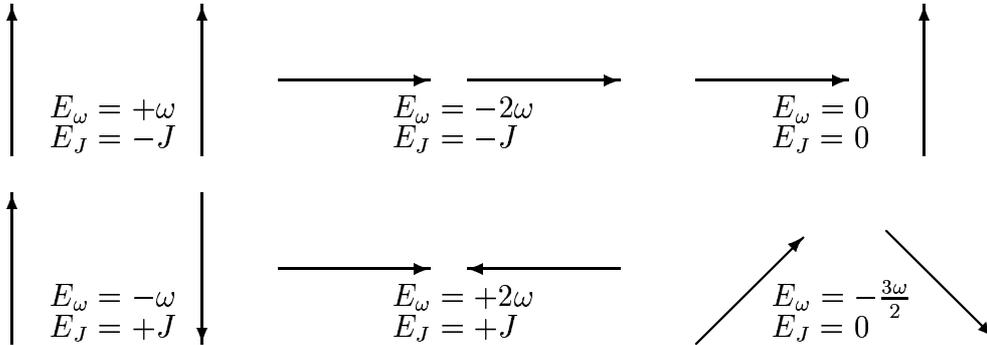


Abbildung 6.5: Dipolwechselwirkungsenergie E_ω und Austauschwechselwirkungsenergie E_J zweier magnetischer Momente in Abhängigkeit ihrer relativen Orientierung zueinander.

Die Schwierigkeit liegt darin, daß die Wandbreite eine Funktion des Radius r ist. Das Auftreten dieses sogenannten *Vortexcores*, bzw. aufgrund der Symmetrie der

Domänenwand des damit verbundenen Blochpunktes², ist ebenfalls eine Folge der konkurrierenden Wechselwirkungen. Am *Vortexcore* kommt es zu der Situation, daß im Fall einer geraden Anzahl von Spins³ (Mittelpunkt zwischen den Gitterplätzen) nur noch vier Spins vorhanden sind, welche versuchen einen Ring zu bilden um damit die Energie zu senken. Dies führt allerdings nur zu einer geringen Energiesenkung. Erst das Herausdrehen der Spins und damit die Bildung des *Vortexcores* führt zu einer stärkeren Energiesenkung, da nun auch die Austauschwechselwirkung einen Beitrag liefert.

Der Zusammenhang zwischen den beiden Wandformen und der Drahtdicke bzw. dem Verhältnis der Dipol-Dipol-Wechselwirkung zur Austauschwechselwirkung $\frac{\omega}{J}$ ist durch die sogenannte Austauschlänge d_{ex} gegeben. Die Austauschlänge d_{ex} ist neben der Domänenwandbreite Δ die zweite fundamentale Größe. Die Austauschlänge ist durch folgenden Ausdruck gegeben

$$d_{ex} = \sqrt{\frac{Ja^2}{6\omega\zeta(3)}} \quad (6.18)$$

mit der Riemannschen Zetafunktion $\zeta(3) \approx 1.2$. Die Austauschlänge gibt den Drahtdurchmesser wieder, bei dem der Übergang zwischen den beiden Wandformen stattfindet: ist der Drahtdurchmesser d kleiner als die Austauschlänge d_{ex} so tritt die transversale Domänenwand auf, andernfalls die Vortexwand. Dies ist analog zu sehen zu dem Auftreten von eindomänigen Nanopartikeln bis zu einer bestimmten Partikelgröße. Überschreitet das Nanopartikel diese Größe ist es für das Partikel energetisch günstiger Domänen zu bilden. In diesem Fall beschreibt die Austauschlänge ebenfalls den Übergang von der einfachen eindomänigen Struktur hin zu der komplexeren Domänenstruktur des Nanopartikels. In diesem Zusammenhang sei auch zu erwähnen, daß mit der Strukturänderung auch eine Änderung der Ummagnetisierung auftritt. Während das eindomänige Teilchen über kohärente Rotation ummagnetisieren kann, kommt es bei Partikeln mit einer Domänenstruktur zu einer Ummagnetisierung durch Verschiebung der Domänenwände. Eine ähnliche Änderung der Dynamik läßt sich im Fall der transversalen bzw. der Vortexdomänenwand nachweisen (siehe Abschnitt 6.4).

Der Übergang von einer Wandform zur anderen läßt sich an einigen charakteristischen Größen festmachen. So ändert sich zum Beispiel die Domänenwandbreite der transversalen Domänenwand auf eine ganz andere Weise mit der Änderung des Verhältnisses $\frac{\omega}{J}$ als die Wandbreite der Vortexwand. Abbildung 6.6 zeigt dies. Während bei der transversalen Domänenwand die Wandbreite kleiner wird mit zunehmender Dipolwechselwirkung (zunehmendes ω) nimmt die Wandbreite der Vortexwand zu. Die Abnahme der Wandbreite im Fall der transversalen Domänenwand

²Unter einem Blochpunkt ist eine punktförmige Singularität der Magnetisierung zu verstehen. Im Fall des diskreten Spinmodells soll unter dem Blochpunkt das punktuelle Aufeinandertreffen zweier magnetischer Momente, mit entgegengesetzter Orientierung, verstanden werden.

³Spin soll im weiteren als Synonym für ein magnetisches Moment verstanden werden.

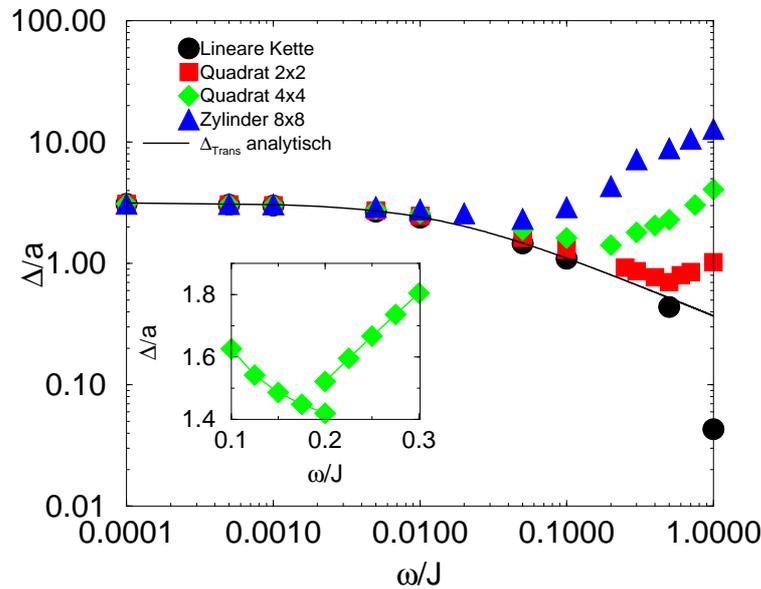


Abbildung 6.6: Domänenwandbreite Δ als Funktion des Verhältnisses $\frac{\omega}{J}$. Die Wandbreite der transversalen Domänenwand (analytische Kurve) ist durch Gl. 6.17 gegeben. Inset: Δ über ω/J eines quadratischen 4x4 Drahtes in der Nähe des Übergangs. ($D/J = 0.05$)

läßt sich leicht klar machen, wenn man sich vor Augen hält, daß die Dipol-Dipol-Wechselwirkung in diesem Fall lediglich als zusätzliche Formanisotropie eingeht und mit zunehmender Anisotropie die Wandbreite abnimmt. Im Fall der Vortexdomänenwand hat die Dipol-Dipol-Wechselwirkung einen ganz anderen Stellenwert. Hier ist sie mitverantwortlich, daß der Wirbel gebildet wird. Eine Zunahme der dipolaren Stärke hat hier zur Folge, daß sich die Struktur des Wirbels ändert und die Wandbreite zunimmt. Die Wandbreite wurde hierbei durch anfitzen eines tanh-Profiles, gemäß Gl. 6.11 bestimmt.

Eine weitere physikalische Größe an der man den Übergang zwischen den Wandformen festmachen kann ist die Energie. Abb. 6.7 zeigt die Energiedichte der Wand σ_{Δ} aufgetragen über $\frac{\omega}{J}$. Deutlich zu erkennen ist der klar definierte Schnittpunkt der beiden Energiedichtekurven, links und rechts ist jeweils eine der Wandformen energetisch günstiger. Allerdings lassen sich beide Kurven in dem jeweils energetisch ungünstigeren Bereich weiterführen, d.h. die jeweils energetisch ungünstigere Wandform ist bis zu einem bestimmten Wert $\frac{\omega}{J}$ stabil. In der Thermodynamik spricht man in diesen Fällen von Überhitzung bzw. Unterkühlung.

Zur weiteren Charakterisierung der Wandformen erweist es sich als zweckmäßig eine weitere physikalische Größe einzuführen, die Zirkulation. Die Zirkulation ist gegeben

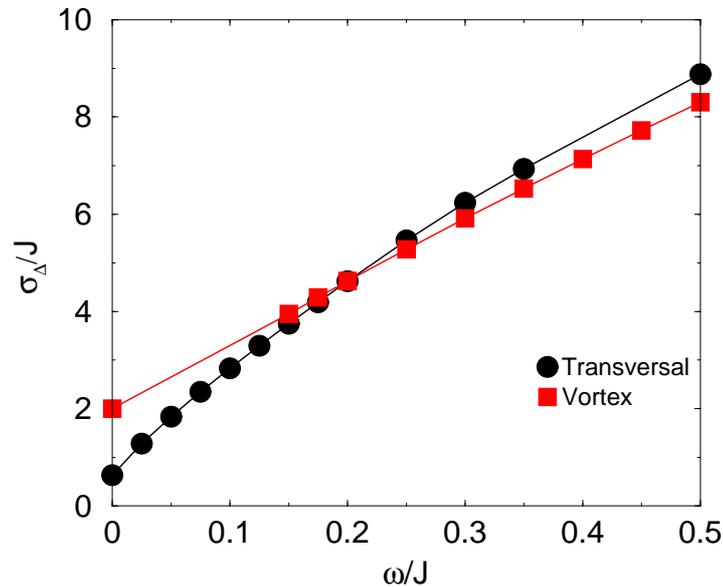


Abbildung 6.7: Domänenwandenergiedichte σ_{Δ} , der transversalen bzw. Vortexdomänenwand, als Funktion von $\frac{\omega}{J}$ (4x4 Quadrat, $D/J = 0.05$)

durch

$$Z = \int (\text{rot} \underline{S})_z dx dy . \quad (6.19)$$

Eng mit der Zirkulation verbunden ist die Windungszahl n , welche definiert ist durch

$$n = \frac{Z}{2\pi r} , \quad (6.20)$$

wobei r der Drahradius ist.

Abb. 6.8 zeigt die Zirkulation $Z_{\max}(x = 0)$ als Funktion der dipolaren Wechselwirkungsstärke $\frac{\omega}{J}$.

Für die transversale Domänenwand bleibt noch zu klären, wie die Formanisotropie durch die Dipol-Dipol-Wechselwirkung in den analytischen Ausdruck Gl. 6.17 eingeht. Wie bereits erwähnt ist die Domänenwandbreite ganz allgemein gegeben durch das Verhältnis der Austauschwechselwirkung J zur Anisotropie D_{eff} , wobei $D_{eff} = D_e + D_{\omega}$ sich aus zwei Anteilen zusammensetzt, der kristallinen Anisotropie D_e und der Formanisotropie D_{ω} . Betrachtet man ein System, bei dem keine kristalline Anisotropie auftritt $D_e = 0$ und vergleicht die Domänenwandbreite Δ (Gl. 6.17) mit der Austauschlänge D_{ex} (Gl. 6.18), so liegt es nahe, $3\zeta(3)\omega$ als Ausdruck für die effektive Formanisotropie D_{ω} anzunehmen.

Diese Überlegung scheint auf den ersten Blick etwas weit hergeholt, allerdings wird

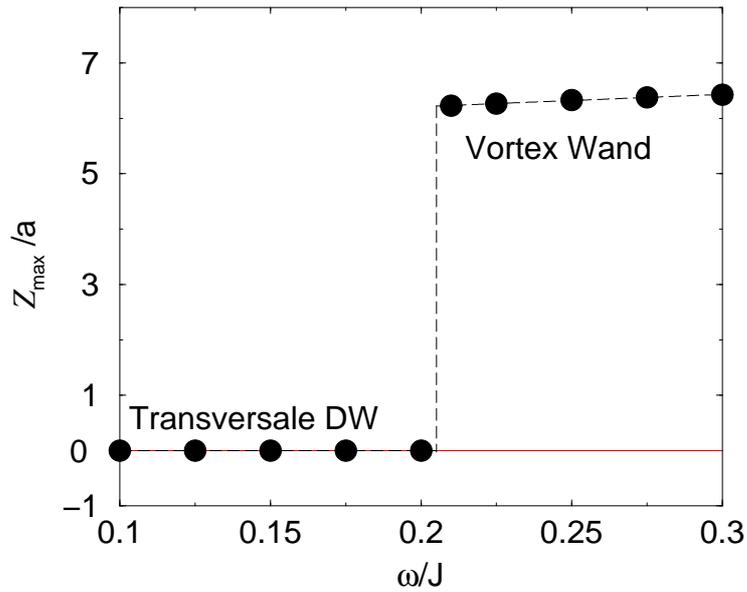


Abbildung 6.8: Zirkulation $T_{\max}(x = 0)$ als Funktion der dipolaren Wechselwirkungsstärke ω . Bei $\omega = \omega_c$ ändert sich die Wandform, dabei kommt es zu einer sprunghaften Änderung der Zirkulation von Null (kein Wirbel = transversale Domänenwand) auf Eins (Wirbel = Vortexwand). (4x4 Quadrat, $D/J = 0.05$)

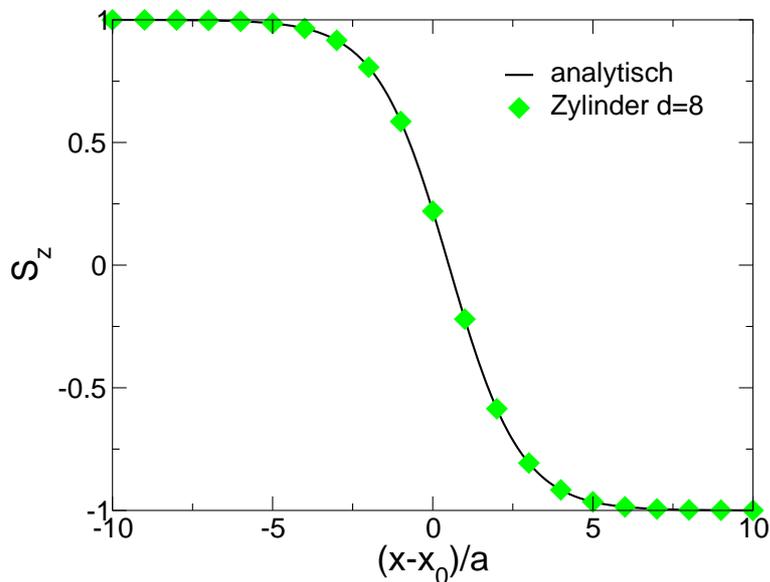


Abbildung 6.9: Überprüfung der Relation für die Formanisotropie: Verglichen wird die unter Berücksichtigung der Formanisotropie berechnete Wandform ($\omega/J = 0.1/3\zeta(3)$ und $D/J = 0$) mit der unter Verwendung der Relation $D_\omega = 3\zeta(3)\omega$ berechneten Wandform ($\omega/J = 0$ und $D/J = 0.1$). Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung beider Kurven, was eine Bestätigung der Annahme darstellt.

sie durch die Computersimulationen bestätigt. Abb. 6.9 zeigt den Vergleich des Domänenwandprofils einer transversalen Domänenwand gerechnet mit Dipol-Dipol-Wechselwirkung und ohne zusätzliche kristalline Anisotropie D_e , verglichen mit dem Domänenwandprofil gerechnet mit einer entsprechenden kristallinen Anisotropie D_e . Das Ergebnis zeigt eine vollkommene Übereinstimmung der Kurven, was die Annahme bestätigt. Die Domänenwandbreite Δ_{Trans} ist also durch

$$\Delta_{Trans} = \sqrt{\frac{Ja^2}{2(D_e + 3\omega\zeta(3))}} \quad (6.21)$$

gegeben. Analoge Rechnungen, welche sowohl die kristalline als auch die Formanisotropie berücksichtigen, lassen sich mit einem tanh-Profil anfitten, bei dem die Domänenwandbreite durch Gl. 6.21 gegeben ist. Eine weitere Bestätigung stellt die analytische Kurve in Abb. 6.6 dar, welche mittels Gl. 6.21 berechnet wurde.

6.3 Domänenwanddynamik: theoretische Betrachtung

Um die Domänenwandform einer bewegten Wand zu berechnen, geht man im Grunde genauso vor wie im statischen Fall (Kapitel 6.1, Gl. 6.1). Dazu stellt man zunächst die zugehörige Energiedichte auf,

$$\mathcal{E} = A \left[(\nabla\theta)^2 + \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} \right] + K \sin^2\theta \quad , \quad (6.22)$$

wobei $\phi = \varphi = \text{const.}$ als Nebenbedingung bereits berücksichtigt wurde. Der Unterschied zur statischen Energiedichte liegt in dem zusätzlichen Summanden $\frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2\theta}{\partial t^2}$, welcher die Zeitabhängigkeit des Winkels θ berücksichtigt.

Das zugehörige Variationsprinzip läßt sich schreiben als

$$\delta \iiint \left\{ A \left[(\nabla\theta)^2 - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} \right] + K \sin^2\theta \right\} dV dt = 0 \quad , \quad (6.23)$$

wobei das veränderte Vorzeichen vor dem neuen Zusatzterm zu beachten ist. Die Korrespondierende Euler-Lagrange Gleichung

$$\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\theta} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\theta_x} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\theta_y} - \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\theta_z} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\theta_t} = 0 \quad , \quad (6.24)$$

mit $\theta_\eta = \frac{\partial\theta}{\partial\eta}$, $\eta = x, y, z, t$, ergibt nach Einsetzen der Energiedichte die dreidimensionale Sine-Gordon Gleichung

$$\Delta\theta - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} = \frac{K}{2A} \sin 2\theta \quad . \quad (6.25)$$

Der eindimensionale Fall ist bereits in Kapitel 3.2 aus der Landau-Lifshitz Gleichung hergeleitet wurden. Die einfachste Domänenwand- oder Solitonenlösung der eindimensionalen Gleichung soll an dieser Stelle kurz skizziert werden. Dazu wird zunächst die Gl. 6.25 mit der Substitution $2\theta = \psi$ in folgende Form gebracht

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \omega_0^2 \sin \psi \quad , \quad (6.26)$$

wobei c_0 und ω_0 durch Gl. 3.24 gegeben sind.

Die Gl. 6.26 lässt sich nun nach der Substitution

$$\xi = x - vt \quad , \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \quad , \quad \frac{\partial^2}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \quad (6.27)$$

leicht auf folgende Gestalt bringen:

$$(c_0^2 - v^2) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} = \omega_0^2 \sin \psi \quad . \quad (6.28)$$

Nach Erweitern mit $\frac{\partial \psi}{\partial \xi}$ lässt sich diese Gleichung leicht aufintegrieren und man erhält:

$$\frac{1}{2} (c_0^2 - v^2) \left(\frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right)^2 = \omega_0^2 (K - \cos \psi) \quad . \quad (6.29)$$

Die Integrationskonstante lässt sich dann aus den Bedingungen

$$x \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad \psi \rightarrow 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad K = 1 \quad (6.30)$$

bestimmen.

Mit $1 - \cos \psi = 2 \sin^2 \frac{\psi}{2}$ lässt sich Gl. 6.29 leicht umformen zu

$$\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = \frac{2\omega_0 \sin \frac{\psi}{2}}{\sqrt{c_0^2 - v^2}} \quad . \quad (6.31)$$

Diese Differentialgleichung lässt sich mittels Separation der Variablen lösen:

$$\frac{1}{2} \int \frac{d\psi}{\sin \frac{\psi}{2}} = \int \frac{\omega_0 d\xi}{\sqrt{c_0^2 - v^2}} \quad (6.32)$$

Die rechte Seite ist dabei trivial, für die linke Seite ergibt sich

$$\frac{1}{2} \int \frac{d\psi}{\sin \frac{\psi}{2}} = \frac{1}{4} \int \frac{d\psi}{\sin \frac{\psi}{4} \cos \frac{\psi}{4}} = \int \frac{d\Theta}{\Theta} \quad (6.33)$$

wobei im letzten Schritt die Substitution

$$\Theta = \tan \frac{\psi}{4} \quad \Rightarrow \quad \frac{d\psi}{d\Theta} = \frac{1}{4 \cos^2 \frac{\psi}{4}} \quad (6.34)$$

verwendet wurde. Damit ergibt sich

$$\theta(x, t) = 2 \arctan \left[\exp \left(\pm \frac{\omega_0}{c_0} \gamma' (x - vt) \right) \right] , \quad (6.35)$$

wobei die Substitution $\psi = 2\theta$ rückgängig gemacht und folgende Abkürzung verwendet wurde⁴:

$$\gamma' = \left(\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_0^2}} \right)^{-1} , \quad |v| < c_0 . \quad (6.36)$$

Es läßt sich nun leicht zeigen, daß sich die Gl. 6.35 in der gewohnten Form schreiben läßt:

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \cos^2 \left(\arctan e^{\pm u} \right) - \sin^2 \left(\arctan e^{\pm u} \right) \\ &= \left[\cos \left(\arccos \left(\frac{1}{\sqrt{1 + e^{\pm 2u}}} \right) \right) \right]^2 - \left[\sin \left(\arcsin \left(\frac{e^{\pm u}}{\sqrt{1 + e^{\pm 2u}}} \right) \right) \right]^2 \\ &= \frac{1 - e^{\pm 2u}}{1 + e^{\pm 2u}} \\ &= \mp \tanh u \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sin \theta &= 2 \sin \left(\arctan e^{\pm u} \right) \cos \left(\arctan e^{\pm u} \right) \\ &= \frac{2 e^{\pm u}}{1 + e^{\pm 2u}} \Big| \cdot \frac{1 - e^{\mp 2u}}{1 - e^{\mp 2u}} \\ &= \frac{2}{e^u + e^{-u}} \\ &= \operatorname{sech} u \end{aligned}$$

wobei

$$u = \frac{\omega_0}{c_0} \gamma' (x - vt)$$

ist. Weiterhin ist noch zu beachten, daß $\frac{\omega_0}{c_0}$ gleich der inversen Domänenwandbreite ist $\Delta^{-1} = \sqrt{\frac{K}{A}} = \frac{\omega_0}{c_0}$.

Ein genaueres Betrachten der Lösung Gl. 6.35 zeigt, daß die Sine-Gordon Gleichung

⁴Achtung: Mit γ' ist die Gl. 6.36 gemeint und nicht das gyromagnetische Verhältnis γ . Die Verwendung von γ' als Abkürzung hat die Bewandnis an die historische Notation der Lorentz-Transformation anzuknüpfen.

invariant ist in Bezug auf die Lorentz-Transformation in \mathbf{r} und t . Weiterhin zeigt ein Vergleich mit der statischen Wandform, daß sich die Breite einer bewegten Wand um einen Faktor $\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c_0}\right)^2}$ verringert, was als ‘‘Lorentz-Kontraktion’’ aufgefaßt werden kann [72, 73]. Ferner folgt die Wandmasse direkt aus der Beziehung

$$E_0 = m_0 c_0^2 \quad , \quad (6.37)$$

wobei es sich um die Ruhemasse per Flächeneinheit der Wand handelt. Die Wandmasse ergibt sich nach Einsetzen der Wandenergie $E_0 = 4\sqrt{AK}$ und $c_0^2 = 8\pi\gamma^2 A$ (Gl. 3.24):

$$m_0 = \frac{1}{2\pi\gamma^2} \sqrt{\frac{K}{A}} \quad . \quad (6.38)$$

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Masse ergibt sich entsprechend zu:

$$m(v) = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c_0}\right)^2}} \quad . \quad (6.39)$$

Allerdings muß an dieser Stelle gesagt werden, daß im Allgemeinen die Geschwindigkeit der Wand v klein gegenüber der Grenzggeschwindigkeit c_0 ist, so daß diese quasi relativistischen Effekte minimal sind.

6.3.1 Die Walker Gleichung

In dem vorangegangenen Abschnitt wurde ganz allgemein die Domänenwandbewegung betrachtet. In diesem Abschnitt soll die Geschwindigkeit einer Domänenwand berechnet werden.

Betrachtet werden soll die Domänenwandbewegung in einem biaxialen Kristall, welcher durch die folgende Energiedichte

$$\mathcal{E} = A \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \sin^2 \theta \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right] + \sin^2 \theta (K_u + K_d \sin^2 \phi) - \mu_s B \cos \theta \quad (6.40)$$

charakterisiert ist.

Der erste Summand ist dabei die Austauschwechselwirkung mit der Austauschkonstante A . Der zweite Summand beschreibt die Anisotropie des Systems mit einer leichten Achse entlang der z -Achse und einer harten Achse in x -Achsenrichtung ($\phi = \frac{\pi}{2}$). Der dritte Summand stellt schließlich eine Ankopplung eines äußeren Magnetfeldes dar, welches in Richtung der leichten Achsenrichtung angelegt ist, und somit die Domänen mit der parallelen Ausrichtung der magnetischen Momente zum Magnetfeld vergrößert und die Domänen mit der antiparallelen Ausrichtung verkleinert. Von Interesse ist hierbei die Geschwindigkeit, mit der dies geschieht, also die

Geschwindigkeit der Domänenwand.

Um die Dynamik zu betrachten muß die entsprechende Bewegungsgleichung, in diesem Fall die Gilbert Gleichung in Polarkoordinaten (Gl. 3.9, Gl. 3.10) gelöst werden. Dazu wird zunächst mit

$$\frac{\partial}{\partial t} = v \frac{\partial}{\partial x} \quad (6.41)$$

die Zeitableitung in eine Ableitung nach dem Ort umgewandelt. Nach Einsetzen der Variation (Euler-Lagrange) $\frac{\delta E}{\delta \theta}$ bzw. $\frac{\delta E}{\delta \phi}$ und nach der Substitution Gl. 6.41 ergeben sich die folgenden Gleichungen:

$$v \sin \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} = -\alpha v \sin^2 \theta \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{2\gamma}{\mu_s} \left[K_d \sin^2 \theta \sin \phi \cos \phi - A \frac{\partial}{\partial x} \left(\sin^2 \theta \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right] \quad (6.42)$$

$$v \sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial x} = \alpha v \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{2\gamma}{\mu_s} \left[\sin \theta \cos \theta \left(K_u + K_d \sin^2 \phi + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right) - A \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right] - \gamma B \sin \theta \quad (6.43)$$

Eine Lösung dieser Gleichung ist der Fall einer Domänenwandbewegung, wobei der Winkel $\phi(x) = \varphi$ räumlich konstant bleibt. Dies bedeutet, daß in Gl. 6.42 und Gl. 6.43 alle Terme mit $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ vernachlässigt werden können.

Nun kann man weiterhin von einer gleichförmigen Bewegung, also von einer konstanten Wandgeschwindigkeit v ausgehen. Dies bedeutet, daß der erste Summand auf der rechten Seite von Gl. 6.43, der die Energiedissipation beschreibt, und der letzte Summand, der dem treibenden Feld entspricht, sich einander kompensieren:

$$\alpha v \frac{\partial \theta}{\partial x} = \gamma B \sin \theta \quad (6.44)$$

Somit bleibt von Gl. 6.43 nur noch der Ausdruck in den eckigen Klammern,

$$A \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = \sin \theta \cos \theta \left(K_u + K_d \sin^2 \varphi \right) \quad (6.45)$$

Nach Erweitern beider Seiten mit $\frac{\partial \theta}{\partial x}$ läßt sich diese Differentialgleichung leicht integrieren und man erhält

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 = \frac{K_u + K_d \sin^2 \varphi}{2A} \sin^2 \theta \quad (6.46)$$

und letztlich

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \sin \theta \sqrt{\frac{K_u + K_d \sin^2 \varphi}{A}} \quad (6.47)$$

Setzt man dies in Gl. 6.44 ein, so erhält man die folgende Gleichung für die Domänenwandgeschwindigkeit [31, 74]

$$v = \frac{\gamma B}{\alpha} \sqrt{\frac{A}{K_u + K_d \sin^2 \varphi}} . \quad (6.48)$$

Diese Gleichung, wird im Weiteren als Walker Gleichung bezeichnet.

Bisher wurde mit Gl. 6.43 nur eine der beiden Gleichungen der Gilbert Gleichung betrachtet. Um das Ergebnis zu verifizieren, setzt man den gewonnenen Ausdruck für $\frac{\partial \theta}{\partial x}$ (Gl. 6.47) in Gl. 6.42 ein. Das Ergebnis ist die folgende Gleichung für die Geschwindigkeit:

$$v = \frac{\gamma K_d \sin 2\varphi}{\mu_s} \sqrt{\frac{A}{K_u + K_d \sin^2 \varphi}} . \quad (6.49)$$

Der Vergleich von Gl. 6.49 mit Gl. 6.48 ergibt, daß

$$\varphi = \frac{1}{2} \arcsin \left(\frac{\mu_s B}{\alpha K_d} \right) \quad (6.50)$$

keine Konstante ist, sondern von dem äußeren Magnetfeld B und der Gilbertdämpfung α abhängt. Dies bedeutet, daß bei konstanter Dämpfung α mit zunehmender Magnetfeldstärke B der Winkel φ zunimmt und die magnetischen Momente immer mehr in harte Achsenrichtung gebracht werden.

Dies hat drei Konsequenzen. Zunächst (für kleine Feldstärken B und große Dämpfungen α) heißt dies, daß eine sich bewegende Blochwand in einem biaxialen Kristall keinen Blochwandcharakter ($\varphi = 0$) mehr besitzt, da nun $\varphi \neq 0$ ist. Zum anderen bedeutet dies, daß sich die Domänenwandbreite mit zunehmender Feldstärke bzw. abnehmender Dämpfung verringert, und somit auch die Geschwindigkeit der Wand. Und weiterhin heißt dies, daß ab einer bestimmten Feldstärke bzw. Gilbertdämpfung $x = \frac{\mu_s B}{\alpha K_d} > 1$, und somit $\arcsin x$ nicht mehr definiert ist. $\arcsin x = 1$ bedeutet, daß $\varphi = \frac{\pi}{2}$, daß also die magnetischen Momente in der Wand in harter Achsenrichtung zeigen. Dieser Fall ist aber energetisch äußerst ungünstig und wird deshalb auch nicht auftreten. In diesem Fall werden andere Effekte auftreten, welche sich im Rahmen einer analytischen Rechnung allerdings nicht angeben lassen und für welche es Computersimulationen bedarf. Diese ergaben, daß im Fall des *Walker breakdowns* die magnetischen Momente zu präzedieren anfangen und die Geschwindigkeit drastisch abnimmt.

Betrachtet man den gegensätzlichen Grenzfall, also eines sehr großen Wertes für die Anisotropiestärke K_d , so wird sich der Winkel φ nur sehr wenig bis gar nicht aus seiner statischen Gleichgewichtslage ($\varphi = 0$) abweichen. In diesem Grenzfall ergibt sich aus der Walker Gleichung die Geschwindigkeitsgleichung von Landau und Lifshitz [16]

$$v = \frac{\gamma B}{\alpha} \sqrt{\frac{A}{K_u}} . \quad (6.51)$$

Den selbigen Grenzfall erhält man für sehr große Gilbertdämpfungen und/oder sehr kleine Magnetfeldstärken, wobei hier zu beachten ist, daß es bei zu kleinen Magnetfeldern unter Umständen zu keiner Domänenwandbewegung kommt [29, 75].

6.3.2 Die Slonczewski Gleichung

Neben der Walker Gleichung und der Geschwindigkeitsgleichung von Landau und Lifshitz existiert noch eine dritte Geschwindigkeitsgleichung, die Gleichung von Slonczewski [29]

$$v = \frac{\gamma B \Delta}{\alpha + 1/\alpha} . \quad (6.52)$$

Diese Gleichung ergibt sich, wenn man nicht wie bei Walker oder Landau und Lifshitz annimmt, daß der Winkel φ zeitlich konstant ist, also die magnetischen Momente in der Wand zu allen Zeiten in die gleiche Raumrichtung zeigen.

Die Ergebnisse lassen sich auf einfache Weise zusammenfassen. Die drei hier vorgestellten Geschwindigkeitsgleichungen haben alle eine recht anschauliche Deutung. Die Geschwindigkeit v einer Domänenwand ist gegeben durch

$$\text{Geschwindigkeit} = \frac{\text{Domänenwandbreite}}{\text{Relaxationszeit}} = \frac{\Delta}{\tau_{\text{Rel}}} . \quad (6.53)$$

Bei den unterschiedlichen Geschwindigkeitsgleichungen wurden unterschiedliche Annahmen bzgl. der Domänenwandbreite und der Relaxationszeit gemacht, welche zu den Unterschieden der einzelnen Gleichungen führt. Bei der Gleichung von Landau und Lifshitz wurde generell angenommen, daß die Domänenwandbreite konstant ist, während Walker diese Annahme nicht getroffen hat.

Bzgl. der Relaxationszeiten, wurde bei Walker und Landau und Lifshitz angenommen, daß die magnetischen Momente auf direktem Weg ummagnetisieren, also der Winkel φ sich nicht ändert ($\dot{\varphi} = 0$), dies führte in beiden Fällen zu der folgenden Relaxationszeit

$$\dot{\varphi} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \tau_{\text{Rel.}} = \frac{\alpha}{\gamma B} . \quad (6.54)$$

Läßt man nun zu, daß die magnetischen Momente während der Ummagnetisierung auch präzedieren ($\dot{\varphi} \neq 0$) so ergibt sich die folgende Relaxationszeit

$$\dot{\varphi} \neq 0 \quad \Leftrightarrow \quad \tau_{\text{Rel.}} = \frac{\alpha + 1/\alpha}{\gamma B} . \quad (6.55)$$

Das unterschiedliche Ummagnetisierungsverhalten und die damit verbundenen unterschiedlichen Relaxationszeiten führen letztlich auf unterschiedliche Geschwindigkeiten, wobei die Geschwindigkeit nach Landau-Lifshitz Gl. 6.51 eine obere Grenze und die Slonczewski Gleichung Gl. 6.52 eine untere Grenze angibt [29]. Aufgrund

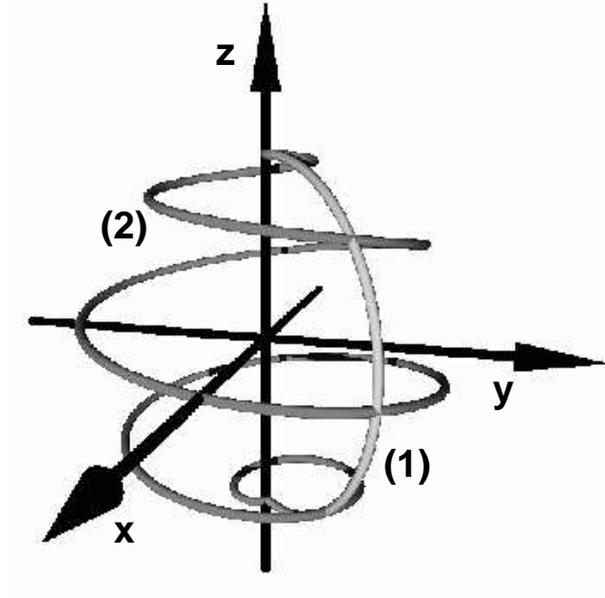


Abbildung 6.10: Mögliche Ummagnetisierungswege eines magnetischen Momentes: (1) direkte Ummagnetisierung, (2) Ummagnetisierung über eine Präzessionsbewegung.

der Längenkontraktion der Domänenwand bei Walker liegt diese Geschwindigkeit zwischen diesen beiden Geschwindigkeiten. Auch dieses Ergebnis ist relativ anschaulich, da bei einer direkten Ummagnetisierung die geringste Ummagnetisierungszeit, also Relaxationszeit, vorliegt, während eine stetige Ummagnetisierung mittels einer Präzessions-Relaxationsbewegung länger dauert.

Interessant ist jetzt noch der Grenzfall kleiner Dämpfungen. Im Fall der direkten Ummagnetisierung ergibt eine verschwindende Dämpfung $\alpha \rightarrow 0$, daß die Relaxationszeit gegen Null geht, also die Geschwindigkeit gegen Unendlich. Allerdings wird vorher eine Längenkontraktion Gl. 6.36 der Domänenwandbreite vonstatten gehen. Dies setzt aber voraus, daß die gesamte Energie in der Wand gespeichert wird, was aber eher unwahrscheinlich ist. Die Computersimulationen in Kapitel 6.5.2 werden zeigen, daß die Geschwindigkeit einen konstanten endlichen Wert hat und daß ein Teil der Energie in Form von Spinwellen emittiert wird. Dies gilt allerdings nur für den Fall, daß der Winkel φ konstant bleibt (Geschwindigkeitsgleichung von Landau-Lifshitz).

Im Fall der direkten Ummagnetisierung und einer nicht allzugroßen Anisotropie K_d (harte Achse, Walker Gleichung) wird allerdings mit abnehmender Dämpfung der Winkel φ gegen $\pm\frac{\pi}{2}$ gehen (Gl. 6.50), also die magnetischen Momente in harte Achsenrichtung gedreht werden. Dies bedeutet aber, daß die magnetischen Momente

anfangen zu präzedieren. Die Geschwindigkeit der Domänenwand geht dabei mit abnehmender Gilbertdämpfung α gegen Null. Das gleiche Verhalten zeigt sich für den Fall der Ummagnetisierung mit Präzession (Slonczewski Gleichung). Der *Walker breakdown* bedeutet ein Übergang des Ummagnetisierungsverhalten von direkter Ummagnetisierung hin zur Ummagnetisierung mit Präzession.

6.4 Domänenwanddynamik: Computersimulation

Die bisherigen Betrachtungen bezogen sich auf Domänenwände in eindimensionalen Systemen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Dynamik der Domänenwände in Nanodrähten untersucht. Wie in Abschnitt 6.2 gezeigt wurde, treten zwei Arten von Domänenwänden auf: Die transversale Domänenwand und die Vortexwand (siehe Abb. 6.4). Aufgrund der unterschiedlichen Wandformen ist auch eine unterschiedliche Dynamik zu erwarten.

Ausgangspunkt der Simulationen sind zylindrische bzw. quadratische Drähte mit ausrelaxierten Domänenwänden. Die unterschiedlichen Drahtformen zeigten dabei keinen merklichen Einfluß auf die Simulationen. Die Domänenwand befand sich beim Start der Simulation etwa $\frac{1}{3}$ der Drahtlänge vom Drahtende entfernt. Nach Einschalten eines äußeren Magnetfeldes, welches längs der Drahtachse zeigte, bewegte sich die Domänenwand längs des Drahtes hin zu dem weiter entfernten Ende des Drahtes. Die Simulation wurde abgebrochen, wenn die Domänenwand etwas weniger als $\frac{1}{3}$ von dem anfangs entfernteren Drahtende sich befand. Somit wurde sicher gestellt, daß die Drahtenden keinen allzugroßen Einfluß auf die Simulationsergebnisse haben. Um die Dynamik zu beschreiben wurde die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung gelöst, wobei das äußere Magnetfeld über den Zeeman-Term in das innere Feld eingeht. Die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung selbst wurde mit dem sogenannten Heun-Verfahren gelöst, wobei zunächst die Temperatur T auf Null gesetzt wurde. In Kap. 7 wird auch die Dynamik der transversalen Domänenwand, sowie der Vortexdomänenwand eingehender betrachtet.

Um die Geschwindigkeit der Domänenwand zu bestimmen, wurden zwei Verfahren verwendet. Das erste Verfahren bestimmt die Geschwindigkeit aus der zeitlichen Änderung der Magnetisierung des Systems. Die Geschwindigkeit ist in diesem Fall gegeben durch

$$v = \frac{L}{2} \frac{dM}{dt} . \quad (6.56)$$

L ist dabei die Drahtlänge und M die Gesamtmagnetisierung. Dieses Verfahren kann jedoch nur verwendet werden, wenn die Magnetisierung sich nur durch die Domänenwandbewegung ändert. Dieses Verfahren ist z.B. nicht geeignet, um die Geschwindigkeit einer Domänenwand bei einer endlichen Temperatur $T \neq 0$ zu bestimmen.

Für diese Fälle wurde ein zweites Verfahren verwendet, bei dem die Geschwindigkeit

direkt aus der zeitlichen Änderung des Ortes der Domänenwand bestimmt wird. In diesem Fall gilt

$$v = \frac{dx_0}{dt} , \quad (6.57)$$

wobei x_0 der Ort der Domänenwand ist. Bei diesem Verfahren muß der Ort der Domänenwand bestimmt werden, was unter der Annahme eines Domänenwandprofils $S_z = \tanh\left(\frac{x-x_0}{\Delta}\right)$ zu einer Bestimmung des Nulldurchgangs der z -Komponente der Magnetisierung S_z wird.

Untersucht wurde nun die Geschwindigkeit der beiden Wandformen als Funktion des äußeren Feldes, der Gilbertdämpfung α , des Verhältnisses der Dipol-Dipol-Wechselwirkung zur Austauschwechselwirkung $\frac{\omega}{J}$, sowie die Abhängigkeit von der Drahtdicke. Ziel der Untersuchung war es herauszufinden, welche der drei Geschwindigkeitsgleichungen (Kapitel 6.3) für die Berechnung der Geschwindigkeit der transversalen bzw. der Vortexdomänenwand herangezogen werden kann. Dies gibt gleichzeitig indirekt Aufschluß über die Art der Dynamik.

Abb. 6.11 zeigt die Abhängigkeit der Geschwindigkeit vom äußeren Feld. Gut zu

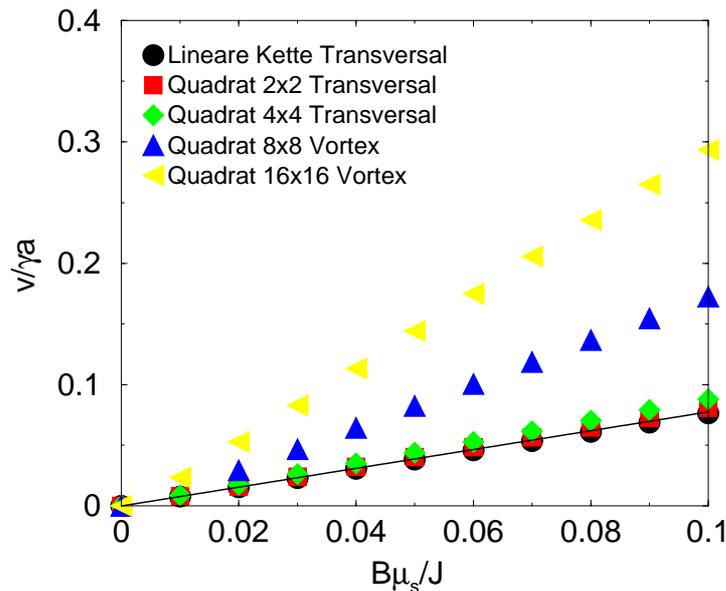


Abbildung 6.11: Abhängigkeit der Geschwindigkeit v von der magnetischen Induktion (äußeres Feld). Die Geschwindigkeit der transversale Domänenwand ist dabei durch Gl. 6.52 gegeben (durchgezogene Linie). ($\omega/J = 0.003$, $D/J = 0.1$, $\alpha = 1$)

erkennen ist das erwartete lineare Verhalten der Geschwindigkeit. Weiterhin ist zu

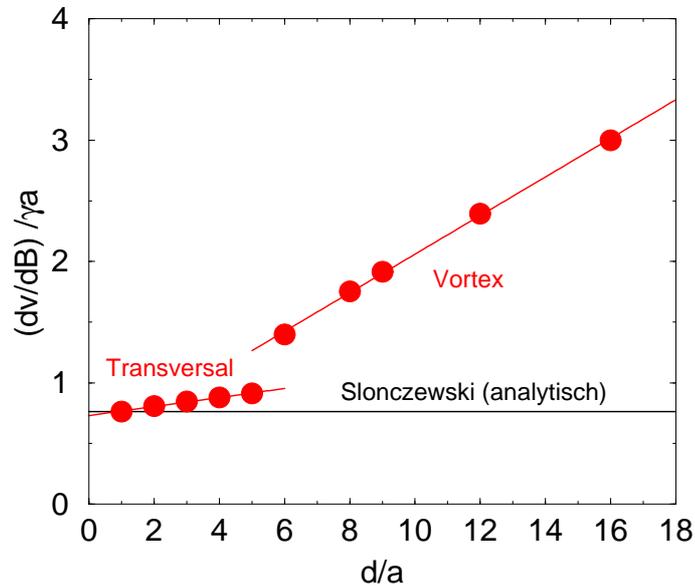


Abbildung 6.12: Beweglichkeit $\frac{dv}{dB}$ als Funktion der Drahtdicke d .
 ($\omega/J = 0.003$, $D/J = 0.1$, $\alpha = 1$)

erkennen, daß die Kurven für die lineare Kette, sowie für den quadratischen Draht mit einer Querschnittsfläche von 2×2 bzw. 4×4 Spins ziemlich eng beieinander liegen und die Kurven des quadratischen 8×8 bzw. 16×16 Drahtes stark abweichen. Erstere Gruppe stimmt relativ gut mit dem analytischen Ergebnis nach Slonczewski überein. Die Abweichung der anderen Kurven läßt sich mit dem Übergang von der transversalen Wandform zu der Vortexwand erklären. Geändert wurde bei dieser Rechnung lediglich die Drahtdicke d , während die Stärke der Dipol-Dipol-Wechselwirkung konstant gelassen wurde. Der Übergang von der transversalen Domänenwand zur Vortexwand liegt nun genau bei einer Drahtdicke zwischen 4 und 8 Spins. Bei den dünneren Drähten, bis zu dem Durchmesser von 4 Spins, liegt die transversale Domänenwand vor. Die Geschwindigkeit läßt sich hier mit der Gleichung von Slonczewski berechnen. Bei den dickeren Drähten liegt die Vortexwand vor, die Geschwindigkeit läßt sich in diesem Fall nicht mehr mit der Gleichung von Slonczewski berechnen. Betrachtet man die Mobilität

$$\mu = \frac{dv}{dB} \quad (6.58)$$

als Funktion der Drahtdicke d (Abb. 6.12) so wird dies noch einmal bestätigt. Deutlich zu erkennen ist der Sprung in der Mobilität, welcher den Übergang von der transversalen Domänenwand zur Vortexwand widerspiegelt. Die Mobilität beider Wandformen steigt linear an, allerdings ist die Mobilität der Vortexwand deutlich

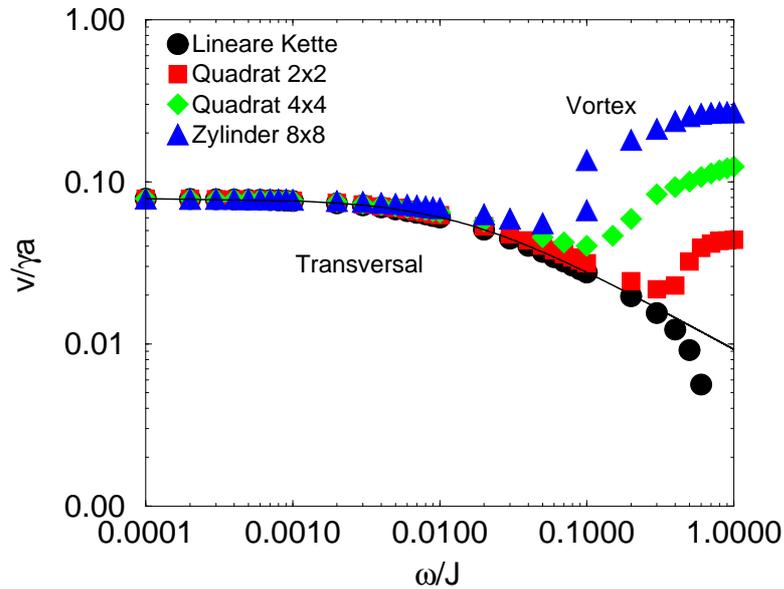


Abbildung 6.13: Geschwindigkeit v als Funktion der Dipolwechselwirkungsstärke ω/J . Die Geschwindigkeit der transversalen Domänenwand wird sehr gut durch die Gl. 6.52 beschrieben (durchgezogene Linie). ($D/J = 0.05$, $\mu_S B/J = 0.05$, $\alpha = 1$)

größer als die der transversalen Wand. Der Übergang zwischen den Wandformen läßt sich auch in der Geschwindigkeit wiederfinden, trägt man diese als Funktion der dipolaren Wechselwirkungsstärke $\frac{\omega}{J}$ auf. Die Abbildung 6.13 korrespondiert mit der Abbildung 6.6, die die Domänenwandbreite als Funktion der Stärke der Dipol-Dipol-Wechselwirkung zeigte. Dies läßt die folgende Schlussfolge zu: Die Änderung des Verhältnisses $\frac{\omega}{J}$ führt zu einer Änderung der Domänenwandbreite Δ derart, daß mit zunehmender Stärke der Dipol-Dipol-Wechselwirkung ω die Wandbreite der transversalen Domänenwand abnimmt und für die Vortexwand zunimmt. Die Ab- bzw. Zunahme der Domänenwandbreite Δ führt wiederum zu einer Ab- bzw. Zunahme der Geschwindigkeit v der Domänenwände. Es gilt also

$$v \propto \Delta, \quad (6.59)$$

was mit den theoretischen Überlegungen aus Abschnitt 6.3 übereinstimmt. Deutlich zu erkennen ist die Übereinstimmung der Geschwindigkeitskurven der transversalen Domänenwand mit der analytischen Rechnung nach Slonczewski [29]. Ebenso ist der Sprung und der damit verbundene Übergang zwischen den Wandformen zu erkennen. Die Sättigung der Geschwindigkeit der Vortexdomänenwand bei großen dipolaren Stärken ist damit zu erklären, daß die Domänenwand bei weiterer

Steigerung der Stärke der Dipol-Dipol-Wechselwirkung nicht mehr der energetisch günstigste Zustand sein wird und die Wand anfängt destabil zu werden.

Bis jetzt wurde gezeigt, daß die Geschwindigkeit der Domänenwand v proportional zur Domänenwandbreite Δ ist. Aus den theoretischen Überlegungen heraus ist klar, daß die Proportionalitätskonstante identisch mit der Relaxationszeit τ_{Rel} sein muß. Aus den Ergebnissen läßt sich bis jetzt sagen, daß die Geschwindigkeit der transversalen Domänenwand durch die Gleichung von Slonczewski zu berechnen ist, während diese Gleichung für die Vortexwand keine Gültigkeit besitzt. Es ist also anzunehmen, daß im Fall der transversalen Domänenwand die Proportionalitätskonstante gleich der Relaxationszeit für den Fall mit Präzession ($\dot{\varphi} \neq 0$) ist und im Fall der Vortexdomänenwand gleich der Relaxationszeit für den Fall direkter Ummagnetisierung ($\dot{\varphi} = 0$). Um dies zu überprüfen und die Domänenwandbewegung im Fall der transversalen, sowie der Vortexdomänenwand besser verstehen zu können ist es notwendig, sich die Dynamik genauer anzuschauen. Abb. 6.14 und Abb. 6.15 zeigen Momentaufnahmen der Domänenwandbewegung der transversalen Domänenwand bzw. der Vortexdomänenwand. Im Fall der transversalen Domänenwand (Abb. 6.14) ist deutlich die Präzession der Spins in der Domänenwand zu erkennen, während der *Vortex* (Abb. 6.15) unverändert bleibt.

Betrachtet man nun die Ummagnetisierung eines einzelnen Spins, so wird dieser erste Eindruck bestätigt. Abb. 6.16 zeigt die Ummagnetisierung, mittels einer Präzessionsbewegung, eines Spins während der Bewegung der transversalen Domänenwand. Diese Präzessionsbewegung äußert sich in der Präzession der gesamten Wand während der Bewegung. Betrachtet man hingegen ein magnetisches Moment während der Ummagnetisierung in dem Draht mit der Vortexwandkonfiguration (Abb. 6.17), so beobachtet man in der Tat eine direkte Ummagnetisierung aller Spins entlang einer Kette und zwar auf dem gleichen direkten Weg.⁵ Dies liegt letztlich daran, daß die Spins gezwungen sind direkt umzumagnetisieren um den Wirbel zu bilden, da eine Zerstörung des Wirbels eine Energieerhöhung bedeuten würde.

Dies bestärkt natürlich die Vermutung, daß im Fall der Vortexdomänenwand die Geschwindigkeitsgleichung von Walker oder die von Landau und Lifshitz Gültigkeit haben muß. In beiden Fällen wurde eine direkte Ummagnetisierung angenommen. Um jetzt den endgültigen Beweis anzutreten, daß die Geschwindigkeit der transversalen Domänenwand durch die Gleichung von Slonczewski und die Geschwindigkeit der Vortexwand sich durch die Gleichung von Walker bzw. von Landau und Lifshitz berechnen läßt, wird im Weiteren die Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der Gilbertdämpfung α untersucht. Wie bereits in Abschnitt 6.3 dargelegt hängen die Relaxationszeiten entscheidend davon ab, ob eine Präzessionsbewegung $\dot{\varphi} \neq 0$ oder

⁵Man kann sich den Draht aus linearen Ketten, längs der Drahtachse, zusammengesetzt denken. Im Fall der transversalen Domänenwand hat jede lineare Kette das gleiche Blochwandprofil. Im Fall der Vortexwand hat jede Kette ebenfalls ein Blochwandprofil allerdings mit einer radiusabhängigen Domänenwandbreite $\Delta(r)$.

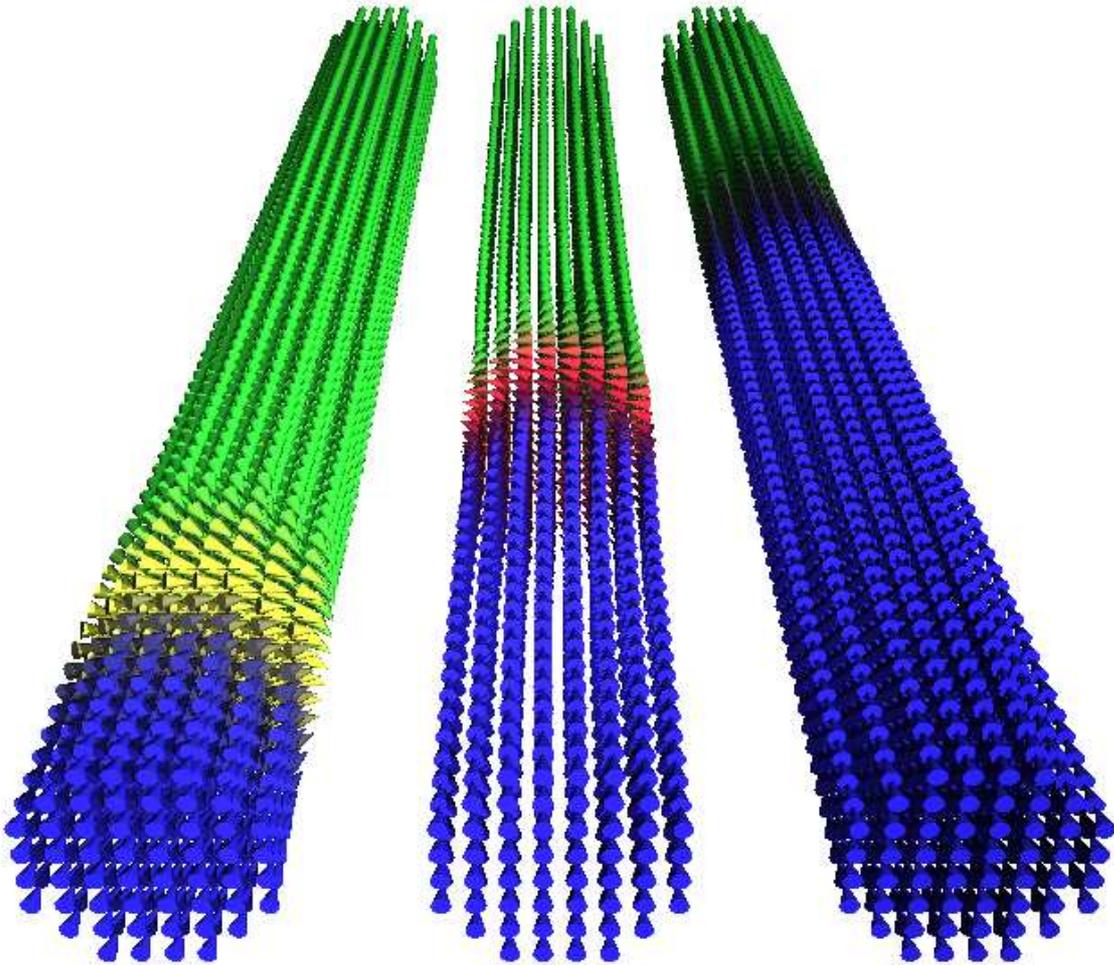


Abbildung 6.14: Momentaufnahmen der Domänenwandbewegung einer transversalen Domänenwand

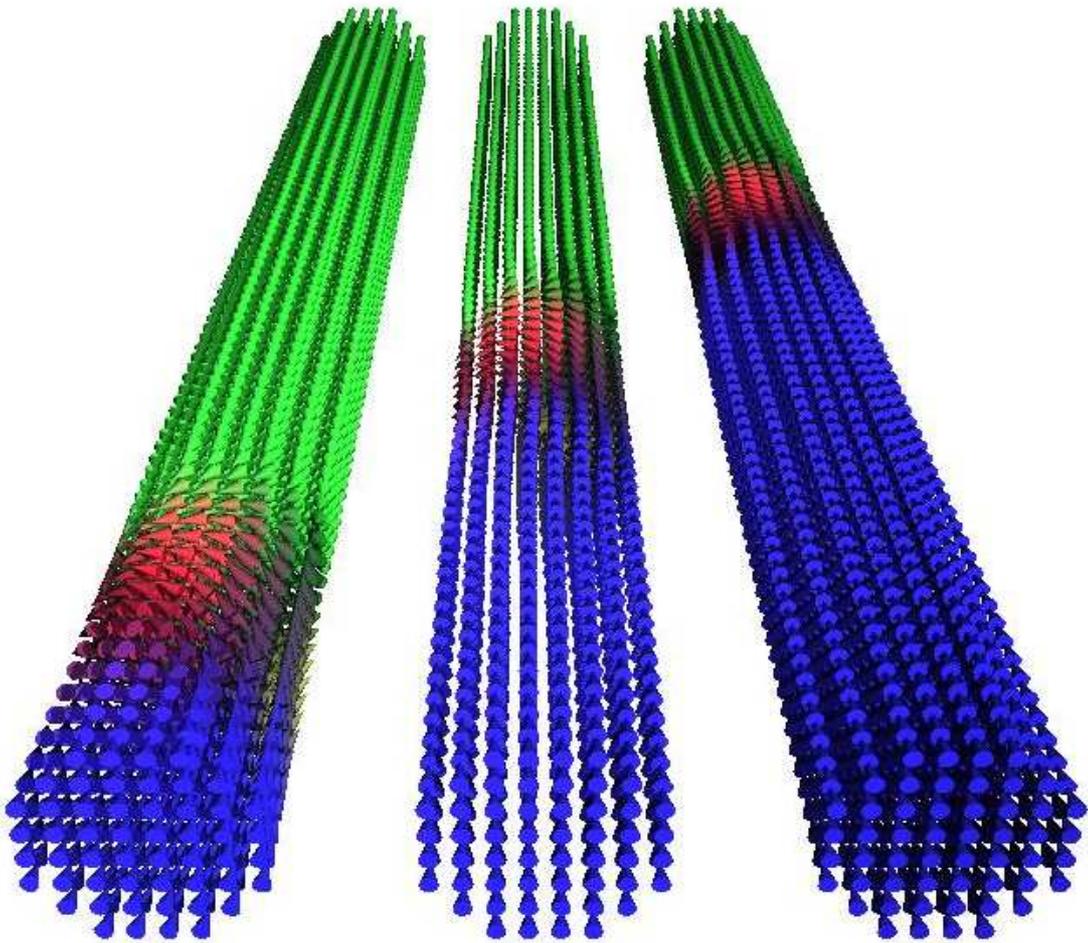


Abbildung 6.15: Momentaufnahmen der Domänenwandbewegung einer Vortexdomänenwand

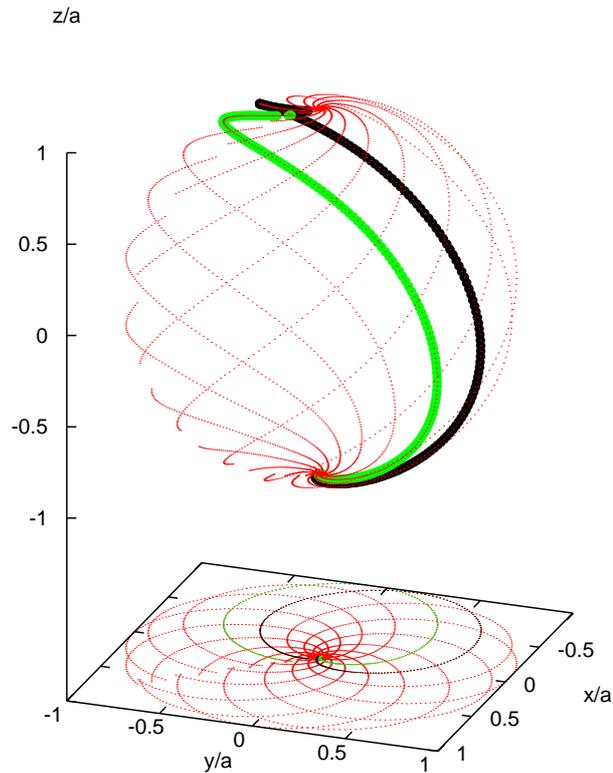


Abbildung 6.16: Ummagnetisierung der magnetischen Momente in einer transversalen Domänenwand mit einer Anisotropieachse. Die Ummagnetisierung während der Domänenwandbewegung erfolgt über eine Präzessions-Relaxations-Bewegung. Die grüne Linie ist der Ummagnetisierungsweg eines magnetischen Momentes, die schwarze Linie des nächsten magnetischen Momentes in $+Z$ -Richtung, welches um einen Gitterplatz versetzt ist. Dieses zweite magnetische Moment magnetisiert über die gleiche Bewegung um, allerdings zeitlich etwas später. Durch die Präzession der magnetischen Momente während der Ummagnetisierung präzediert auch die Domänenwand während der Bewegung. ($\omega/J = 0.0025$, $D/J = 0.05$, $\mu_s B/J = 0.05$, $\alpha = 1$)

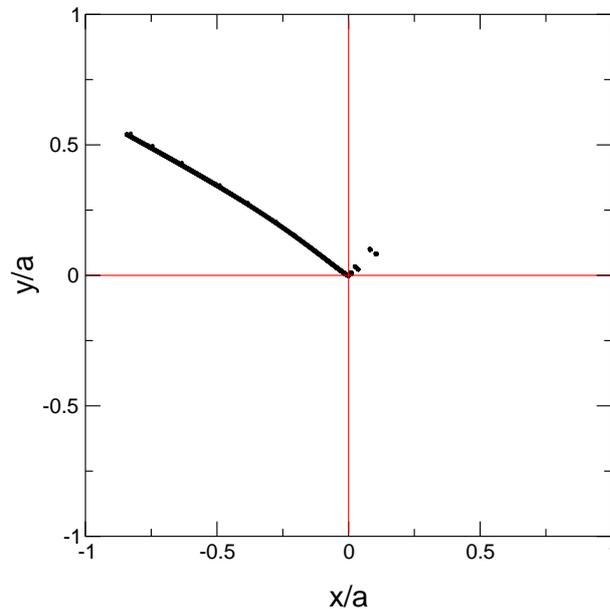


Abbildung 6.17: Projektion des Ummagnetisierungsweges eines magnetischen Momentes, einer linearen Kette (x und x bzw. r und ϕ Konstant), der Vortexdomänenwand. Alle magnetischen Momente magnetisieren über den gleichen Weg direkt um. Der Winkel $\phi(x, y)$ in der Querschnittsebene $x - y$ -Ebene ist abhängig von der gewählten Kette: $\phi(x, y) = \phi(r, \varphi) = \varphi \pm \frac{\pi}{2}$. ($\omega/J = 0.5$, $D/J = 0.05$, $\mu_s B/J = 0.05$, $\alpha = 1$)

eine direkte Ummagnetisierung ($\dot{\varphi} = 0$) vorliegt. Im ersteren Fall (Präzession) hat die Relaxationszeit eine α -Abhängigkeit, im zweiten Fall (direkt) manifestiert sich eine $(\alpha + 1/\alpha)$ -Abhängigkeit der Relaxationszeit.

Betrachtet man die Abhängigkeit der Mobilität⁶ von der Gilbertdämpfung α (Abb. 6.18), so findet man eine klare $1/(\alpha + 1/\alpha)$ -Abhängigkeit der Mobilität im Fall der transversalen Domänenwand und eine $1/\alpha$ -Abhängigkeit im Fall der Vortexdomänenwand.

Dies hängt natürlich mit der unterschiedlichen Arten der Ummagnetisierung und der damit verknüpften Relaxationszeit zusammen. Abb. 6.18 zeigt eindeutig den Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit und der Relaxationszeit

$$v \propto \frac{1}{\tau_{Rel}} \quad , \quad (6.60)$$

⁶Die Mobilität ist definiert als $\mu = dv/dB$, und damit indirekt proportional zur Relaxationszeit $\tau_{Relax} = \Delta/v$. v ist dabei die Domänenwandgeschwindigkeit, Δ die Domänenwandbreite und B die magnetische Induktion, also das äußere Magnetfeld.

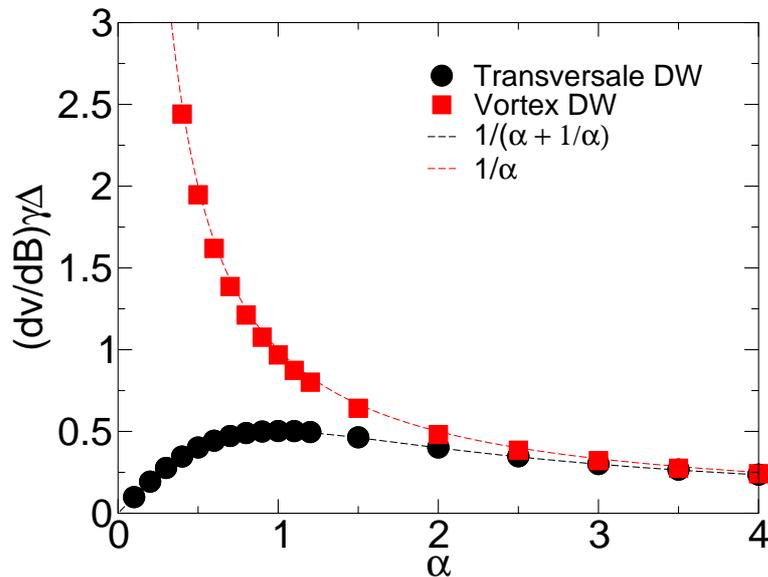


Abbildung 6.18: Domänenwandmobilität der transversalen bzw. der Vortexdomänenwand als Funktion der Gilbertdämpfung α . ($\omega/J = 0.01$ (transversale Domänenwand), $\omega/J = 0.7$ (Vortexdomänenwand), $D/J = 0.05$, $\mu_S B/J = 0.05$, $d/a = 4$)

wobei die α -Abhängigkeit der Relaxationszeit davon abhängt ob der Spin präzediert oder nicht.

Die Ergebnisse sind in voller Übereinstimmung mit den theoretischen Überlegungen und zeigen, daß die Geschwindigkeit der transversalen Domänenwand in der Tat mit der Gleichung von Slonczewski berechnet werden kann, solange man ein Präzession der Spins während der Domänenwandbewegung zuläßt. Die Geschwindigkeit der Vortexdomänenwand läßt sich durch die Gleichung von Walker oder die Gleichung von Landau und Lifshitz berechnen. Aufgrund der Tatsache, daß sich ein stabiler Wirbel bildet ist es anzunehmen, daß der Winkel ϕ , den die magnetischen Momente mit der Querschnittsebene des Drahtes haben, in guter Näherung als konstant anzunehmen ist, es also keinen sogenannten *Walker breakdown* gibt. Zumindest wurde in dem in dieser Arbeit verwendeten Parameterbereich kein solcher Einbruch der Geschwindigkeit festgestellt. Somit hat also die Geschwindigkeitsgleichung von Landau und Lifshitz Gültigkeit.

Das Problem hier ist nur, daß es keinen analytischen Ausdruck für die Wandbreite gibt und man immer mit einer mittleren Wandbreite auskommen muß, da die Domänenwandbreite zudem noch eine Funktion des Radius ist. Im Fall der transversalen Domänenwand läßt sich die Domänenwandbreite analytisch angeben (Gl. 6.21) und die Geschwindigkeit läßt sich eindeutig durch die Gleichung von Slonczewski

rechnen.

6.4.1 Domänenwanddynamik im XYZ-Modell

Dieses Teilkapitel stellt einen Einschub dar, in dem Domänenwände und Domänenwanddynamik im XYZ-Modell betrachtet werden soll.

Bis jetzt wurden nur Domänenwände in Nanodrähten betrachtet, die eine Anisotropieachse (leichte Richtung) aufweisen, welche längs der Drahtachse orientiert war. Im allgemeinen wird jedoch jede Raumrichtung eine andere Anisotropie aufweisen, so daß man z.B. eine leichte Achse längs der Drahtachse hat und eine harte Achse in einer der beiden Raumrichtungen, welche die Querschnittsebene des Drahtes aufspannen. In diesem Fall werden sich die magnetischen Momente in der Domänenwand nach der Raumrichtung ausrichten, welche senkrecht zu der harten Achsenrichtung liegt. Während der Bewegung bleiben die magnetischen Momente in dieser Achsenrichtung, d.h. sie werden leicht aus dieser Achsenrichtung herausgedreht, wobei der Winkel φ von dem angelegten Feld abhängt. Bei einer bestimmten Stärke des angelegten Magnetfeldes kommt es zu dem sogenannten *Walker breakdown* und zu einer rapiden Absenkung der Geschwindigkeit. Dieser hängt natürlich auch von der Stärke der zusätzlichen Anisotropie ab (Siehe Kap. 6.3.1, Gl. 6.50).

Ein System, an dem sich dies sehr gut studieren läßt sind Domänenwände im XYZ-Modell. Bei dem XYZ-Modell handelt es sich um ein System mit biaxialer Anisotropie (zwei Anisotropieachsen). Der Zusammenhang mit dem Heisenberg Modell mit biaxialer kristalliner Anisotropie ist in Kapitel 2.1 bereits gegeben wurden.

Abweichend von der Darstellung Gl. 2.3 in Kapitel 2.1 soll die folgende Darstellung der Hamiltonfunktion des XYZ-Modells

$$\mathcal{H}_{XYZ} = -J \sum_i \left[\eta (1 - 2\epsilon) S_i^x S_{i+1}^x + \eta S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z \right] \quad (6.61)$$

$0 \leq \eta \leq 1$, $\eta \neq 1/2$, $\epsilon \geq 0$ betrachtet werden. Die Domänenwandlösung einer transversalen Domänenwand ist nun gegeben durch [76]:

$$\begin{aligned} S_z &= \tanh \left(x \operatorname{arcosh} \frac{1}{\eta} \right) \\ S_y &= \operatorname{sech} \left(x \operatorname{arcosh} \frac{1}{\eta} \right) . \end{aligned} \quad (6.62)$$

Diese Lösung stimmt mit der Domänenwandlösung Gl. 6.11 überein, wobei die Domänenwandbreite in diesem Fall gegeben ist durch $\Delta = (\operatorname{arcosh}(1/\eta))^{-1}$. Man beachte, daß die Domänenwandlösung unabhängig ist von ϵ . Betrachtet man nun noch die Austauschkopplung $J_x = -J\eta(1 - 2\epsilon)$ genauer, so stellt man fest, daß im Fall $\epsilon > 1/2$ eine antiferromagnetische und $\epsilon < 1/2$ eine ferromagnetische Kopplung vorliegt. In beiden Fällen hat man aber die gleiche Domänenwandlösung Gl. 6.62.

Die unterschiedliche Kopplung hat aber dennoch einige Konsequenzen, welche sich in dem dynamischen Verhalten der Domänenwände äußern. Am besten läßt sich dies anhand der Mobilität demonstrieren.

Betrachtet man die Mobilität in Abhängigkeit von der Gilbertdämpfung α für

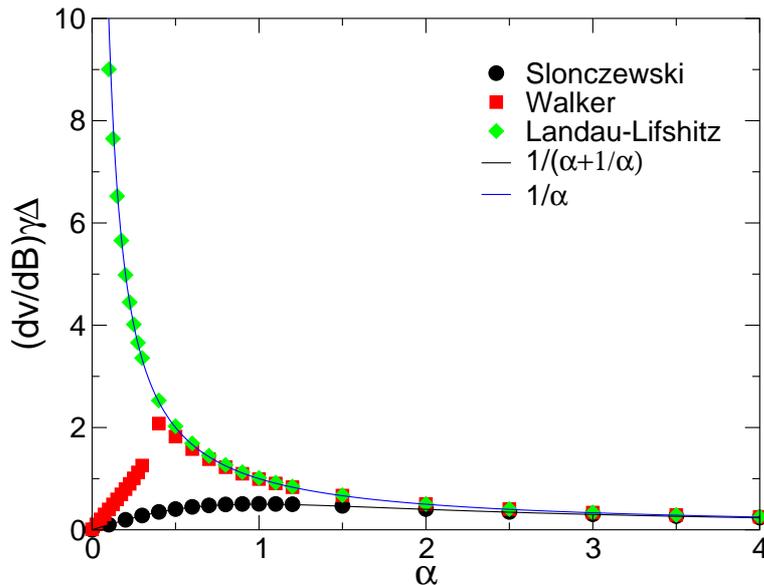


Abbildung 6.19: Domänenwandmobilität als Funktion der Gilbertdämpfung α im Fall des XYZ-Modells. Je nach Einstellung der Austauschkopplung läßt sich ein unterschiedliches Verhalten der Ummagnetisierung, und somit der Mobilität beobachten. ($J = 1$, $\eta = 7/10$, Slonczewski: $\epsilon = 0$, Walker: $\epsilon = 1/4$, Landau-Lifshitz: $\epsilon = 3/4$)

die drei möglichen Fälle einer ferromagnetischen Kopplung ($\epsilon = 1/4$), einer antiferromagnetischen Kopplung ($\epsilon = 3/4$) und dem Fall mit uniaxialer Anisotropie ($\epsilon = 0$), so ergibt sich folgendes Bild (Abb. 6.19): Im Fall der uniaxialer Anisotropie findet man wieder das $1/(\alpha + 1/\alpha)$ -Verhalten, welches auf eine Präzessions-Relaxationsbewegung hindeutet. In der Tat weisen die Simulationen eine solche Ummagnetisierung auf. In diesem Fall bewegt sich somit die Domänenwand mit einer Geschwindigkeit die durch die Slonczewski Gleichung Gl. 6.52 gegeben ist. Anders sieht es im Fall der biaxialen Anisotropie aus. Hier sorgt die zusätzliche Anisotropie dafür, daß es zu einer direkten Ummagnetisierung kommt. Der Unterschied zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Kopplung besteht in einer resultierenden unterschiedlich starken Anisotropie. Im Fall der antiferromagnetischen Kopplung ist die resultierende Anisotropie so stark, daß der Winkel φ unabhängig vom äußeren Feld ist. In diesem Fall ist die Geschwindigkeit

durch die Geschwindigkeitsgleichung von Landau und Lifshitz Gl. 6.51 gegeben. Im Fall der ferromagnetischen Kopplung ist die Anisotropie nicht so stark, so daß eine Änderung des Winkels φ zu beobachten ist. Die Geschwindigkeit ist in diesem Fall durch die Gleichung Gl. 6.49 von Walker gegeben. Weiterhin kommt es in diesem Fall auch zu dem sogenannten *Walker breakdown* bei kleinen Dämpfungen. Hierbei fällt die Mobilität ab und geht gegen Null.

Im Bereich großer Dämpfungen läßt sich unabhängig von der Art der Austauschkopplung im biaxialen Fall die $1/\alpha$ -Abhängigkeit finden, welche die direkte Ummagnetisierung widerspiegelt. Im Fall des *Walker breakdowns* kommt es dann zu einer zusätzlichen Präzessionsbewegung, so daß die Mobilität bzw. Geschwindigkeit zwischen den Geschwindigkeiten von Slonczewski und der Geschwindigkeit nach Landau und Lifshitz liegt. Die genaue Diskussion wurde bereits in Kapitel 6.3.2 geführt.

Zum Schluß bleibt noch zu klären was passiert, wenn man zu kleinen Dämpfungen übergeht. In der Realität hat man es mit Dämpfungen zu tun, welche im Bereich von $\alpha = 0.0002 \dots 0.08$ liegen. Betrachtet man den Grenzfall kleiner Dämpfungen $\alpha \ll 1$ und insbesondere den Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ so sagt die Theorie voraus, daß es im Fall der Präzession ($v \propto 1/(\alpha + 1/\alpha)$) die Geschwindigkeit gegen Null geht. Im Fall der direkten Ummagnetisierung hängt die Geschwindigkeit davon ab, ob es zu einem *Walker breakdown* kommt oder nicht. Liegt der Fall eines *Walker breakdowns* vor, so ist die Geschwindigkeit Null, wenn nicht, sagt die Theorie (Geschwindigkeitsgleichung von Landau und Lifshitz) eine unendliche Geschwindigkeit voraus. Schaut man sich nun die Geschwindigkeit bzw. die Mobilität für den letzteren Fall an, so stellt man fest, daß die Geschwindigkeit nicht unendlich ist, sondern einen endlichen, von Null verschiedenen Wert, hat.

Die Lösung für das Versagen der Theorie in diesem Fall ist relativ einfach. Es zeigt sich, daß ein weiterer Effekt auftritt, welcher von der Theorie nicht berücksichtigt wurde. In diesem Fall kommt es zu einer Domänenwandbewegung unter Emission von Spinwellen, zu deren Erzeugung ein Teil der Gesamtenergie des Systems aufgewendet wird. Diese Energie steht der Domänenwand nicht mehr als kinetische Energie zur Verfügung, so daß eine endliche Domänenwandgeschwindigkeit vorliegt. Eine genauere Diskussion soll in den nächsten Abschnitten folgen.

6.5 Von Spinwellen und Domänenwänden

Der nächste Abschnitt behandelt zunächst die Wechselwirkung bzw. Beziehung von Spinwellen und Domänenwänden bevor im übernächsten Abschnitt die Domänenwanddynamik im Regime kleiner Dämpfungen untersucht wird.

6.5.1 Spinwellen in und an statischen Domänenwänden

Bereits einige Jahre nachdem F. Bloch die Spinwelle als Elementaranregung des Ferromagnetikums und deren Quantisierungseinheit die Magnonen einführte [77] und aufbauend auf diese Arbeit H. Bethe die Bethe-Theorie [78] herleitete, führte C. Kittel die nach ihm benannte Kittel-Gleichung [79] ein. Mit dieser Gleichung läßt sich das Resonanzspektrum eines Systems in einem äußeren Feld angeben. Kittel leitete diese Gleichung aus der Landau-Lifshitz Gleichung her, indem er die Landau-Lifshitz-Gleichung um einen konstanten Anfangszustand nach kleinen Abweichungen entwickelte und diese nach dem linearen Term der Entwicklung abbrach. Das Ergebnis der Linearisierung ist ein Gleichungssystem zweier gekoppelter Gleichungen, welches sich leicht lösen läßt. Verwendet man das gleiche Verfahren um die Landau-Lifshitz Gleichung [32, 80, 81], bzw. das korrespondierende Energiefunktional [82] zu linearisieren, so endet man zunächst bei einer Art Schrödinger Gleichung. Als Ausgangszustand wird dabei eine transversale Domänenwand verwendet. Zu dem gleichen Ergebnis gelangt man, wenn man die Sine-Gordon Gleichung [83, 84] linearisiert. Dies soll hier kurz demonstriert werden.

Ausgangspunkt sei die folgende Lösung

$$\Psi = \psi_S + \tilde{\phi}, \quad |\tilde{\phi}| \ll 1, \quad (6.63)$$

der Sine-Gordan Gleichung

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \omega_0^2 \sin \Psi = 0. \quad (6.64)$$

Dabei ist $\psi_S = 4 \arctan \left[\exp \left(\pm \frac{x}{\Delta} \right) \right]$ die statische Lösung der transversalen Domänenwand und $\tilde{\phi}$ eine kleine Störung bzgl. dieser statischen Lösung. Setzt man dies in die Sine-Gordan Gleichung Gl. 6.64 ein und linearisiert bzgl. $\tilde{\phi}$ so erhält man die folgende Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial x^2} + \omega_0^2 \left[1 - 2 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{x}{\Delta} \right) \right] \tilde{\phi} = 0. \quad (6.65)$$

Als Lösungsansatz verwendet man $\tilde{\phi} = \psi(x) e^{-i\omega t}$ wodurch man bei der folgenden Schrödinger Gleichung

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + (V(x) - E) \right] \psi(x) = 0, \quad (6.66)$$

mit dem Potential

$$V(x) = -2\Delta^{-2} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{x}{\Delta} \right) \quad (6.67)$$

endet. E ist dabei gegeben durch $E = \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{c_0^2}$. Für die weitere Betrachtung ist es nun noch zweckmäßig den Ort dimensionslos zu betrachten, also x/Δ durch x zu ersetzen. Damit ergibt sich für das Potential

$$V(x) = -2\text{sech}(x) . \quad (6.68)$$

Dieses Potential findet man in der Literatur unter dem Namen *Pöschl-Teller Potential*, wobei ganz allgemein

$$V(x) = -m(m+1)\text{sech}(x) \quad (6.69)$$

gilt. Den speziell hier vorliegenden Fall $m = 1$ findet man auch unter dem Namen *reflectionless potential* (dt.: reflektionsfreies Potential). Der Name kommt aus der Streutheorie, da dieses Potential keine Rückstreuung erzeugt. Die weiteren Betrachtungen sollen zunächst mit dem allgemeinen *Pöschl-Teller Potential* durchgeführt werden, wobei am Ende immer auf den hier vorliegenden Spezialfall $m = 1$ verwiesen werden soll.

Gl. 6.66 läßt sich mittels zweiter Quantisierung explizit lösen, dazu werden die folgenden Auf- bzw. Absteigeoperatoren definiert [43, 85]

$$Q_{\pm}^{(m)} = \mp \frac{d}{dx} + m \tanh(x) . \quad (6.70)$$

Mit den Operatoren $Q_{+}^{(m)}$ und $Q_{-}^{(m)}$ läßt sich nun $\mathcal{H}^{(m)}$ faktorisieren

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(m)} &= Q_{+}^{(m)} Q_{-}^{(m)} - m^2 \\ &= Q_{-}^{(m+1)} Q_{+}^{(m+1)} - (m+1)^2 \end{aligned} \quad (6.71)$$

und es gelten folgende Relationen für den Hamiltonoperator Gl. 6.71 bzw. für die Auf- und Absteigeoperatoren Gl. 6.70

$$\psi^{(m-1)} = Q_{-}^{(m)} \psi^{(m)} ,$$

$$\psi^{(m+1)} = Q_{+}^{(m+1)} \psi^{(m)} ,$$

$$\mathcal{H}^{(m)} \psi^{(m)} = E \psi^{(m)} .$$

Die Eigenfunktionen lassen sich jetzt allgemein schreiben als

$$\psi_k^{(m)} = Q_{+}^{(m)} \dots Q_{+}^{(2)} Q_{+}^{(1)} e^{ikx} , \quad (6.72)$$

mit dem Eigenwert $E = k^2$.

Im Fall $m = 1$ ergibt sich die folgenden Relation:

$$\psi_k^{(1)} = Q_{+}^{(1)} e^{ikx} = (-ik + \tanh(x)) e^{ikx} . \quad (6.73)$$

Es handelt sich dabei, um an einer Domänenwand lokalisierte, freie Spinwellenzustände. Um auch noch die gebundenen Zustände $E < 0$ zu berechnen, wird zunächst die folgende Normierung betrachtet:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\psi^{(m-1)} \right)^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^{(m)} Q_+^{(m)} Q_-^{(m)} \psi^{(m)} \\ &= (E + m^2) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\psi^{(m)} \right)^2 \end{aligned} \quad (6.74)$$

Eine Weiterführung der Rekursion zu noch kleineren m -Werten bewirkt, daß die Normierung irgendwann negativ wird, z.B. bei $\psi^{(l-1)}$. Dies kann verhindert werden, wenn man die Rekursion Gl. 6.74 an der entsprechenden Stelle abbricht, z.B. wenn die gebundenen Zustände gegeben sind durch

$$E = -l^2, \quad l = 1, 2, \dots, m.$$

Damit ergibt sich

$$Q_-^{(l)} \psi^{(l)} = 0 . \quad (6.75)$$

Die Gleichung Gl. 6.75 läßt sich mit

$$Q_-^{(l)} = \frac{d}{dx} + l \tanh(x)$$

aufintegrieren, das Ergebnis ist:

$$\psi^{(l)} = \operatorname{sech}^l(x) . \quad (6.76)$$

Im Fall der gebundenen Spinwellen ist $l = m = 1$ zu wählen, so daß sich als Lösung

$$\psi^{(1)} = \operatorname{sech}(x) \quad (6.77)$$

ergibt. Das Ergebnis für die freien Spinwellen läßt sich auch etwas anders auffassen. Faßt man nämlich das Potential Gl. 6.67 als Streupotential auf und betreibt Streutheorie, so hat man vor der Streuung an dem Potential $V(x) = -2\operatorname{sech}^2(x)$ ebene Wellen e^{ikx} und nach der Streuung modifizierte ebene Wellen Gl. 6.73. Man kann nun zeigen, daß bei der Streuung keine Rückstreuung auftritt, allerdings kommt es zu einer Phasenverschiebung, welche durch den Vorfaktor gegeben ist [86]. Dies wird von R. Hertel durch Computersimulationen bestätigt [87].

Betrachtet man eine Blochwand in einem dünnen Film [88] oder eine transversale Domänenwand in einem zylindrischen Draht so läßt sich zeigen, daß in der Wand im Fall der 2D Filmstruktur (3D Zylinderstruktur) ein 1D Kanal (2D Kreisscheibe) vorliegt, in dem (der) sich die in der Domänenwand gebundenen Spinwellen frei bewegen können.

Bis jetzt wurden immer nur statische Domänenwände betrachtet. A. A. Thiele [33] betrachtete als erster Spinwellen an einer sich bewegenden Domänenwand, wobei er aber kein äußeres Feld berücksichtigte. Simulationen zeigen aber, daß es zu keiner Domänenwandbewegung ohne ein treibendes äußeres Feld oder zumindest eine sonstige Störung kommt.

Die Arbeit von D. Bouzidi [89] beschäftigt sich mit der Wirkung von Spinwellen auf die Geschwindigkeit von Domänenwänden. Der Autor kann mittels einer recht komplizierten feldtheoretischen Rechnung zeigen, daß es im Fall großer Dämpfung keine Spinwellen gibt, und reproduziert für die Geschwindigkeit das Ergebnis von Landau und Lifshitz (siehe Abschnitt 6.3). Seine Annahme war hierbei, daß die magnetischen Momente in der Domänenwand während der Domänenwandbewegung nicht präzedieren, also $\dot{\phi} = 0$ ist.

Weiter konnte er zeigen, daß bei geringer Dämpfung Spinwellen existieren und eine endliche Geschwindigkeit der Wand im Grenzfall verschwindender Dämpfung $\alpha = 0$ vorliegt. Dies ist anders als bei Landau und Lifshitz [16], wo die Geschwindigkeit unendlich wird.

Im Fall der Vortexwand liegt eine Wandform vor, für die die Annahme, daß die Spins in der Wand nicht präzedieren, erfüllt ist. Das Gleiche gilt für transversale Domänenwände mit einer antiferromagnetischen Austauschisotropie einer der senkrechten Magnetisierungskomponenten. Für diese Wandformen wird das von Bouzidi vorhergesagte Verhalten durch Simulationen bestätigt [90].

Der nächste Abschnitt beschäftigt sich ausführlicher mit der Domänenwandbewegung im Regime kleiner Dämpfungen und dem Grenzfall verschwindender Dämpfung.

6.5.2 Domänenwanddynamik und Spinwellen

Betrachtet man nun die Grenzfälle kleiner bzw. großer Gilbertdämpfung, so stellt man fest, daß der Grenzfall großer Dämpfungen recht uninteressant ist. Aufgrund der großen Dämpfung wird die Präzession unterdrückt und es existieren nur gedämpfte direkte Ummagnetisierungen. Dies ist auch der Grund, wieso die Mobilitäten der transversalen, sowie der Vortexdomänenwand in Abb. 6.18 gleich sind.

Interessanter ist der Grenzfall kleiner Dämpfungen, da hier meist mehr Energie in das System von außen eingebracht wird, als durch die Dämpfung wieder aus dem System heraus gelangt. Somit kommt es zur Anregung von Spinwellen, welche unter Umständen sogar zur völligen Ummagnetisierung des Systems führen können [27, 91]. Dieser Grenzfall ist weiterhin deswegen interessant, da er die Realität darstellt. Realistische Werte der Gilbertdämpfung liegen im Bereich sehr kleiner Dämpfungen zwischen $\alpha = 0.001$ und 0.08 .

Betrachtet man zunächst noch einmal die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung Gl. 3.15 für den Grenzfall verschwindender Dämpfung $\alpha \rightarrow 0$, so hat man eine

ungedämpfte Präzession der magnetischen Momente im inneren Feld \mathcal{H}_i

$$\dot{\mathbf{S}}_i = -\frac{\gamma}{\mu_s} \mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i \quad . \quad (6.78)$$

Das System soll sich im Grundzustand oder zumindest in einem stabilen Zustand befinden. Weiterhin soll kein äußeres Magnetfeld anliegen. Dann gilt allgemein $\dot{\mathbf{S}}_i = 0$, also $\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i = 0$. Mit einem äußeren Feld läßt sich das innere Feld schreiben als

$$\mathbf{H}_i = \mathbf{H}_i^0 + \mu_s \mathbf{B} \quad , \quad (6.79)$$

mit dem inneren Feld ohne Zeemanterm $\mathbf{H}_i^0 = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_i}$ und $\mu_s \mathbf{B}$ dem Anteil des äußeren Feldes (Zeemanterm). \mathbf{H}_i^0 ist das innere Feld, welches von der Austauschwechselwirkung, der Dipol-Dipol-Wechselwirkung und den Anisotropien herrührt.

Im Fall der transversalen Domänenwand, mit einer Rotationssymmetrie in der Querschnittsebene, also ohne zweite Anisotropie, ist $\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i^0 = 0$, also $\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i = \mathbf{S}_i \times \mu_B \mathbf{B}$ ist. In diesem Fall kommt es zu einer Präzession der magnetischen Momente in der Wand in dem äußeren Magnetfeld mit der Lamorfrequenz $\omega = \gamma B \mu_B / \mu_s$. Dies bedeutet gleichzeitig, daß es zu keiner Domänenwandbewegung kommt, also die Geschwindigkeit Null ist. Dies ist in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Simulation (Abb. 6.18) bzw. den theoretischen Betrachtungen zur Domänenwandbewegung (Abschnitt 6.3).

Im Fall der transversalen Domänenwand mit einer zweiten Anisotropie bzw. im Fall der Vortexdomänenwand ist diese Rotationssymmetrie der magnetischen Momente nicht mehr gegeben. Damit ändert sich das interne Feld während der Präzession in dem äußeren Feld, so daß $\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i^0$ nicht mehr Null ist.

Die beiden Fälle sollen im Weiteren genauer untersucht werden, beginnend mit der transversalen Domänenwand mit einer zusätzlichen Anisotropie in der Querschnittsebene des Drahtes.

Transversale Domänenwand mit biaxialer Anisotropie

Die Geschwindigkeit einer Domänenwand mit biaxialer Anisotropie läßt sich analytisch rechnen. Dies wurde von Landau und Lifshitz [16] bzw. später von Walker [74] getan, wobei die Autoren zu unterschiedlichen Ergebnissen bzgl. des hier betrachteten Grenzfalles kamen. Durch die Annahme, daß es zu einer direkten Ummagnetisierung der magnetischen Momente während der Domänenwandbewegung kommen soll, kommt es in beiden Fällen zu der gleichen Abhängigkeit der Relaxationszeit τ_{Rel} von der Gilbertdämpfung α . Allerdings unterscheiden sich die Arbeiten dahingehend, daß Landau und Lifshitz zusätzlich annahmen, daß der Winkel φ , den die Spins bzgl. der Ebene, welche von den Spins selbst und der Kette längs derer die Spins aufgereiht sind, als konstant anzusehen ist. Walker übernahm diese Annahme nicht und konnte vielmehr zeigen, daß dieser Winkel von der Geschwindigkeit der

Wand und von der Dämpfung α abhängt (siehe Abschnitt 6.3). Im Fall der verschwindenden Dämpfung tritt dann der sogenannte *Walker breakdown* auf, so daß die Geschwindigkeit der Wand in diesem Fall Null ist.

Die Dynamik für diesen Grenzfall läßt nun sich ebenfalls analytisch rechnen. Dies

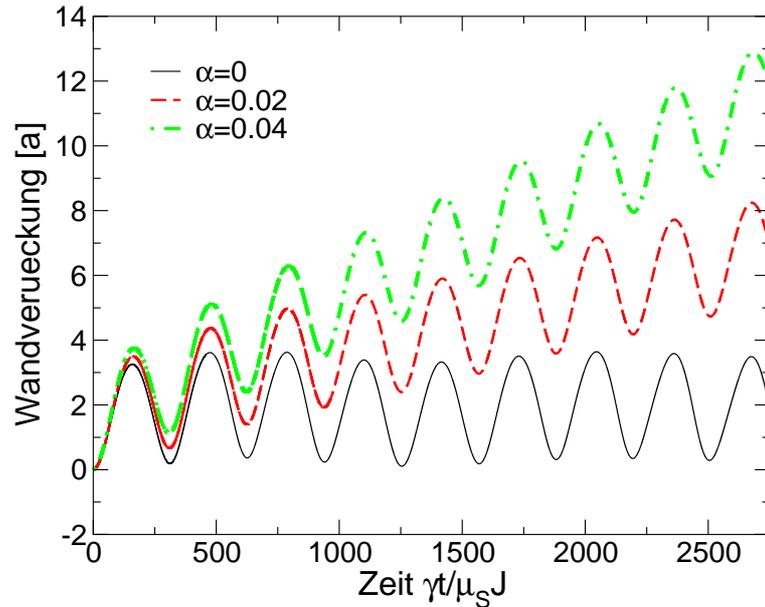


Abbildung 6.20: Oszillatorische Domänenwandbewegung im Fall der transversalen Domänenwand in einem biaxialen ferromagnetischen Nanodraht. ($D_z/J = 0.01$, $D_x/J = 0.005$, $\mu_s B/J = 0.01$)

wurde von A. M. Kosevich [92] getan. Kosevich zeigt, daß sich in diesem Grenzfall als Lösung der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung eine sich um eine feste Position oszillierende Domänenwand ergibt. Aufgrund dieser oszillatorischen Bewegung ist letztendlich die effektive Geschwindigkeit der Wand gleich Null. Dies ist in Übereinstimmung mit der Geschwindigkeit nach Walker.

Der Vergleich der analytischen Rechnung von Kosevich mit Computersimulationen bestätigt diese Oszillation. Dabei spielt es keine Rolle, ob die zweite Anisotropie durch eine kristalline Anisotropie [90] oder durch eine Formanisotropie [93] hervorgerufen wird. Abb. 6.20 zeigt die zeitliche Veränderung des Ortes der biaxialen transversalen Domänenwand für verschiedene Werte von α . Gut zu sehen ist die oszillatorische Bewegung des Ortes. Im Fall der nicht verschwindenden Dämpfung ($\alpha = 0.02, 0.04$) ist zusätzlich noch eine Bewegung der Domänenwand in Richtung des angelegten Feldes zu erkennen. Im Fall verschwindender Dämpfung ($\alpha = 0$) erkennt man, daß wenn die Domänenwand um einen festen Ort oszilliert, es gleichzeitig

aber auch leichte Driftbewegungen zu beiden Seiten hin gibt, wobei die Driftbewegung längs des Feldes zu überwiegen scheint. Die Simulationen zeigen weiter, daß es zu einer Oszillation der magnetischen Momente in der Wand kommt und daß der Richtungswechsel immer dann auftritt, wenn die magnetischen Momente in Richtung der harten Achsenrichtung, also der zweiten Anisotropierichtung, zeigen. Im Fall der Filmstruktur [93] zeigen die Spins dann gerade aus der Filmebene heraus. Während dieser Richtungswechsel werden Spinwellen erzeugt, welche aufgrund der Impulserhaltung für die Driftbewegung der Wand verantwortlich sind. Gleichzeitig wird diese Driftbewegung durch das äußere Feld verstärkt bzw. behindert was dazu führt, daß sich die Wand auch in diesem Fall bewegt, wenn auch recht langsam.

Vortexdomänenwand

Schaut man sich zunächst noch einmal die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung ohne Dämpfung ($\alpha = 0$) Gl. 6.78 an, so ist klar, daß $\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i = 0$ nur für den statischen Fall (ohne äußeres Feld) Gültigkeit besitzt. Mit äußerem Feld fangen die magnetischen Momente an zu präzedieren. Gleichzeitig wird damit aber das interne Feld geändert. Das Ergebnis ist eine sich bewegende Vortexdomänenwand hinter der Spinwellen zu

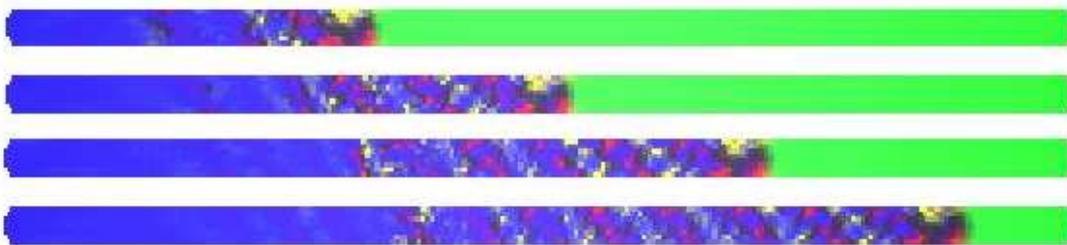


Abbildung 6.21: Vortexdomänenwand: Wandbewegung im Grenzfall verschwindender Dämpfung $\alpha = 0$. Dargestellt sind Momentaufnahmen (Draufsicht) zu äquidistanten Zeitpunkten. Zu erkennen ist eine sich mit endlicher Geschwindigkeit bewegende Vortexdomänenwand und Spinwellen, welche sich hinter der Domänenwand befinden. Die Farben Grün und Blau stellen die zwei entgegengesetzt orientierten Domänen dar. Rot und Gelb, sowie Schwarz sind Magnetisierungskomponenten in der Querschnittsebene des Drahtes. Rot und Gelb sind dabei entgegengesetzt orientiert. ($\omega/J = 0.2$, $D/J = 0.05$, $\mu_s B/J = 0.1$)

erkennen sind (Abb. 6.21). Dargestellt ist ein Teil des Drahtes zu unterschiedlichen äquidistanten Zeitpunkten. Wie unschwer zu erkennen ist, bewegt sich die Vortexdomänenwand mit einer endlichen Geschwindigkeit.

Betrachtet man den Querschnitt des Drahtes während der Domänenwandbewegung,

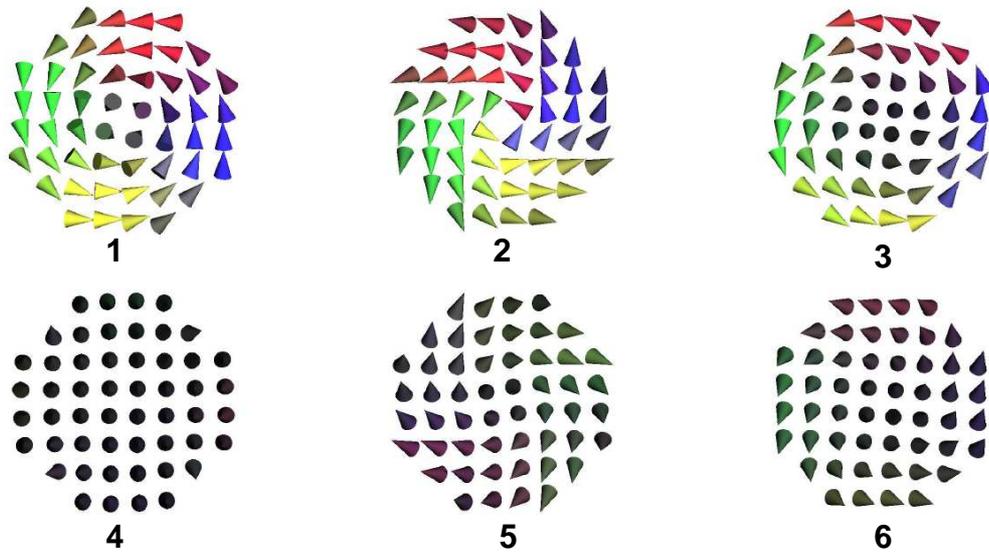


Abbildung 6.22: Drahtquerschnitt während der Domänenwandbewegung der Vortexdomänenwand im Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$. (1: Vortexdomänenwand, 2-6: Momentaufnahmen von den Spinwellen)
 ($\omega/J = 0.2$, $D/J = 0.05$, $\mu_s B/J = 0.1$, $\alpha = 0.02$)

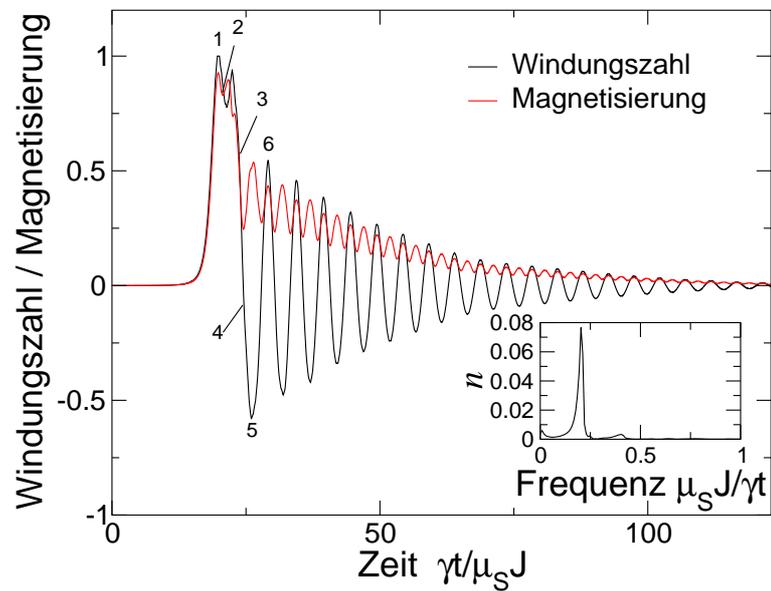


Abbildung 6.23: Windungszahl und Querschnittsmagnetisierung als Funktion der Zeit. Die Zahlen korrespondieren mit den Momentaufnahmen von Abb. 6.22.
 ($\omega/J = 0.2$, $D/J = 0.05$, $\mu_s B/J = 0.1$, $\alpha = 0.02$)

so sieht man zunächst den Wirbel der Vortexdomänenwand (1 in Abb. 6.22) und anschließend die Spinwellen, welche eine Rotationssymmetrie aufweisen (2-6 in Abb. 6.22). Dies legt nahe, neben der Querschnittsmagnetisierung⁷ auch die Windungszahl Gl. 6.20 zu betrachten. Abb. 6.23 zeigt die Windungszahl und die Querschnittsmagnetisierung als Funktion der Zeit. Die Zahlen korrespondieren mit den Zeitpunkten der Momentaufnahmen in Abb. 6.22.

Gut zu erkennen ist die Oszillation der Windungszahl. Die Fouriertransformation dieser Oszillation (inneres Bild in Abb. 6.23) liefert einen scharfen Peak, was auf eine diskrete Frequenz der Spinwellen hinweist.

Die Querschnittsmagnetisierung zeigt ebenso ein oszillatorisches Verhalten, wobei aufgrund der Quadratbildung der Mittelwerte keine negativen Werte auftreten, und somit die Minima der Oszillation der Windungszahl als Maxima erscheinen. Die Oszillation selbst ist auf ein "Rein-" und "Rausdrehen" der magnetischen Momente in die Querschnittsebene zurückzuführen. Gleichzeitig kommt es, aufgrund der Dipol-Dipol-Wechselwirkung, fast immer zu einer ringförmigen Anordnung der in die Querschnittsebene gedrehten magnetischen Momente.

Transversale Domänenwände im XYZ-Modell

An dieser Stelle sei noch einmal auf den Zusammenhang zwischen der Austauschisotropie und der kristallinen Anisotropie (Kap. 2.1) und den sich daraus ergebenden Konsequenzen bzgl. der Wandform und Wandgeschwindigkeit (Kap. 6.4.1) hingewiesen werden.

Der Fall der ferromagnetischen Kopplung reproduziert die Ergebnisse des Abschnitts über die transversalen Domänenwände mit biaxialer Anisotropie. Hier läßt sich ebenfalls das oszillatorische Hin- und Herlaufen der Domänenwand beobachten. Abb. 6.24 zeigt die x - und die y -Komponenten der magnetischen Momente der Domänenwand als Funktion des Ortes und der Zeit. Zu erkennen sind neben der Oszillation auch die auftretenden Spinwellen, welche zu der kleinen aber stetigen Verrückung der Domänenwand führen.

Im Fall der antiferromagnetischen Kopplung reproduziert man die Ergebnisse der Vortexdomänenwand. Hier läßt sich eine sich bewegende Domänenwand beobachten, welche Spinwellen emittiert. Abb. 6.25 zeigt die x - und die y -Komponenten

⁷Die Querschnittsmagnetisierung ist definiert als

$$M = \sqrt{M_x^2 + M_y^2},$$

mit

$$M_\rho = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^\rho, \quad \rho \in \{x, y\}.$$

N ist dabei die Anzahl der magnetischen Momente innerhalb des Drahtquerschnitts.

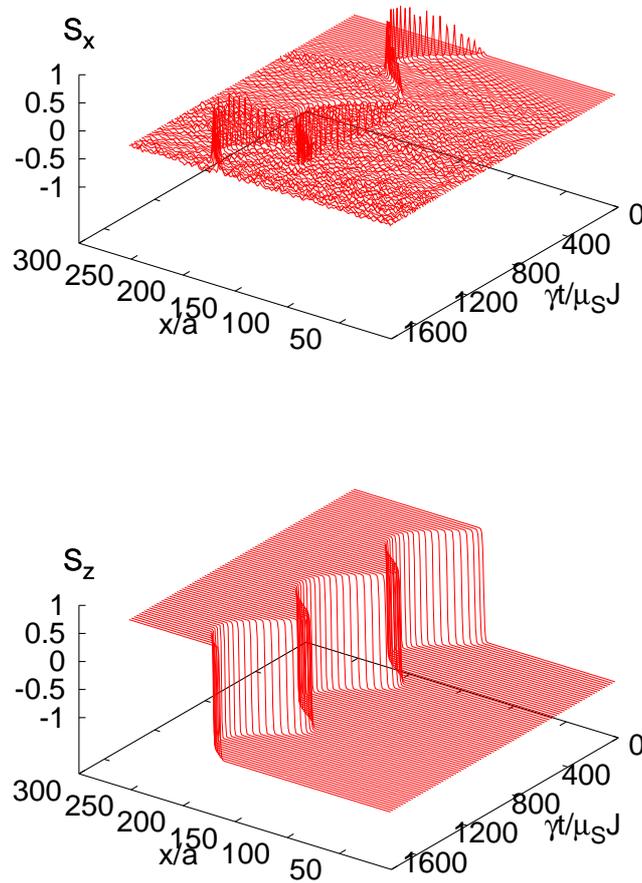


Abbildung 6.24: Domänenwandbewegung einer transversalen Domänenwand mit ferromagnetischer Kopplung im Grenzfall verschwindender Gilbertdämpfung $\alpha \rightarrow 0$. S_x - und S_z -Komponente der magnetischen Momente als Funktion des Ortes und der Zeit. Neben der räumlichen Oszillation der Domänenwand sind die während der Wendungen emittierten Spinwellen (S_x -Komponente) gut zu erkennen. ($\eta = 7/10$, $\epsilon = 1/4$, $\mu_S B/J = 0.005$, $\alpha = 0$)

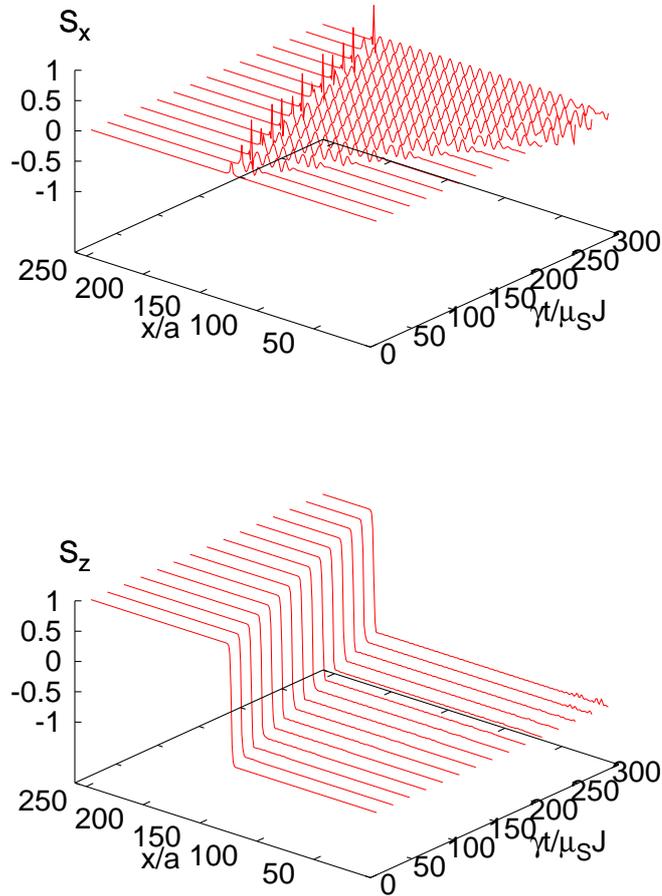


Abbildung 6.25: Domänenwandbewegung einer transversalen Domänenwand mit antiferromagnetischer Kopplung im Grenzfall verschwindender Gilbertdämpfung $\alpha \rightarrow 0$. S_x - und S_z -Komponente der magnetischen Momente als Funktion des Ortes und der Zeit. Gut zu erkennen sind die emittierten Spinwellen hinter der Domänenwand. ($\eta = 7/10$, $\epsilon = 3/4$, $\mu_S B/J = 0.02$, $\alpha = 0$)

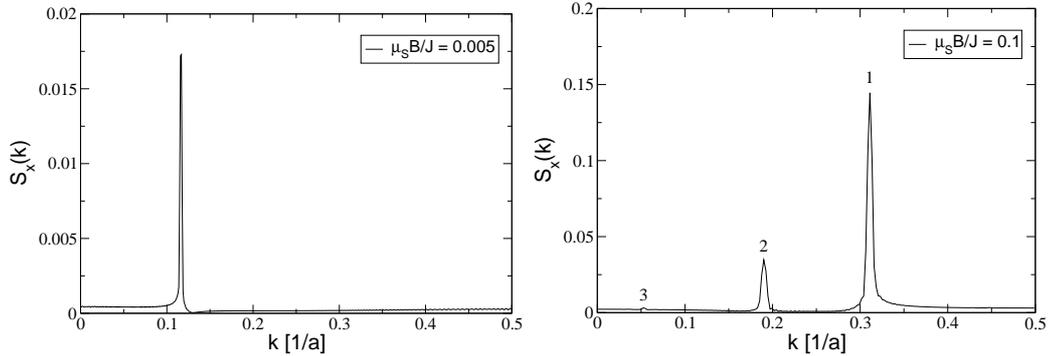


Abbildung 6.26: Fourieranalyse der Spinwellen (S_x -Komponente) für zwei verschiedene Magnetfeldstärken. ($\eta = 7/10$, $\epsilon = 3/4$)

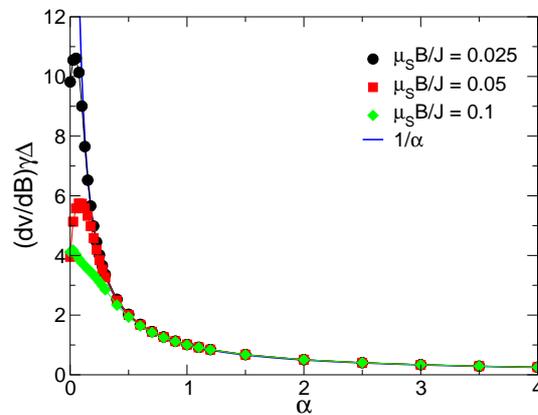


Abbildung 6.27: Mobilität vs. Gilbertdämpfung α für verschiedene Magnetfeldstärken im Fall des XYZ-Modells mit antiferromagnetischer Kopplung. ($J = 1$, $\eta = 7/10$, $\epsilon = 3/4$)

der magnetischen Momente als Funktion von Ort und Zeit. Gut zu erkennen ist die geradlinige Bewegung der Domänenwand und die emittierten Spinwellen hinter der Domänenwand. Eine Untersuchung der Spinwellen mittels Fouriertransformation liefert dabei ein bzw. mehrere diskrete Frequenzen (Abb. 6.26). Es bedarf zukünftig allerdings einer weiteren und genaueren Untersuchung (möglichst mit analytischer Unterstützung), um den Sachverhalt der Spinwellenanregung besser zu verstehen. Ebenso bedarf es noch einer genaueren Klärung des Verhaltens der Domänenwandgeschwindigkeit bzw. Mobilität, als Funktion der Gilbertdämpfung α , für verschiedene Stärken des äußeren Magnetfeldes (Abb. 6.27). Zu erkennen ist ein unterschiedliches Verhalten der Mobilität. Insbesondere ist der Zusammenhang zwischen der (oder den) Spinwellenfrequenz(en) und der (Zeeman-) Energie unklar. Aus zeitlichen Gründen konnte dies im Rahmen dieser Arbeit nicht realisiert werden.

7 Thermisch aktivierte Domänenwände

In den vorangegangenen Kapiteln wurden Domänenwände und deren Dynamik betrachtet. Dabei wurde der Einfluß der Temperatur vernachlässigt. Mit der Langevin Dynamik wurde bereits in Kapitel 5.1 eine Methode aufgezeigt, mit welcher Temperatureffekte in die Dynamik bzw. Statik integriert werden können. Mit dem *heat bath* Monte Carlo Algorithmus und der lokalen Molekularfeldnäherung sollen in diesem Abschnitt zwei weitere Methoden verwendet werden, um die Temperatur zu berücksichtigen. Diese Verfahren werden dann angewendet, um die Thermodynamik von Domänenwänden zu untersuchen.

Die in diesem Kapitel gezeigten Resultate bezüglich der Thermodynamik von Transversalen Domänenwänden, berechnet mittels Molekularfeldrechnungen, entstammen dabei aus der Diplomarbeit von N. Kazantseva [12, 68]. Die Ergebnisse sollen hier im Hinblick auf die weitergehende Untersuchung von Vortexdomänenwänden und Vortexstrukturen, sowie im Hinblick auf einen Vergleich mit Monte Carlo Rechnungen diskutiert werden. Am Ende des Kapitels soll dann noch kurz der Einfluß der Temperatur auf die Dynamik der Domänenwände betrachtet werden.

7.1 Einfluß der Temperatur auf Domänenwände

7.1.1 Transversale Domänenwand

Betrachtet man eine transversale Domänenwand, so findet man zwei Magnetisierungsrichtungen. Zum einen hat man eine Magnetisierung in Richtung der leichten Achse in den Domänen und zum anderen eine Magnetisierungsrichtung senkrecht dazu in der Domänenwand. Betrachtet man diese Magnetisierungskomponente als Funktion der Temperatur, so findet man, daß die Magnetisierungskomponente senkrecht zur leichten Achse bei einer kritischen Temperatur T^* , welche kleiner als die Curietemperatur T_c ist, verschwindet. Die Magnetisierung in leichter Achsenrichtung hingegen wird erst bei der Curietemperatur T_c Null (Abb. 7.1, [68, 94, 95]).

Verantwortlich hierfür ist zum einen die Anisotropie, allerdings ist die Anisotropie nicht allein für diesen Effekt verantwortlich. Die kritischen Temperaturen hängen weiterhin stark von der Wechselwirkung der magnetischen Momente ab. In den Domänen liegt aufgrund der parallelen Ausrichtung der magnetischen Momente eine stärkere Kopplung vor, als in der Domänenwand. Dies läßt sich am besten klar machen, wenn man sich die Austauschwechselwirkung anschaut. In den Domänen hat man z.B. als Austauschwechselwirkungsenergie zwischen zwei magnetischen Momen-

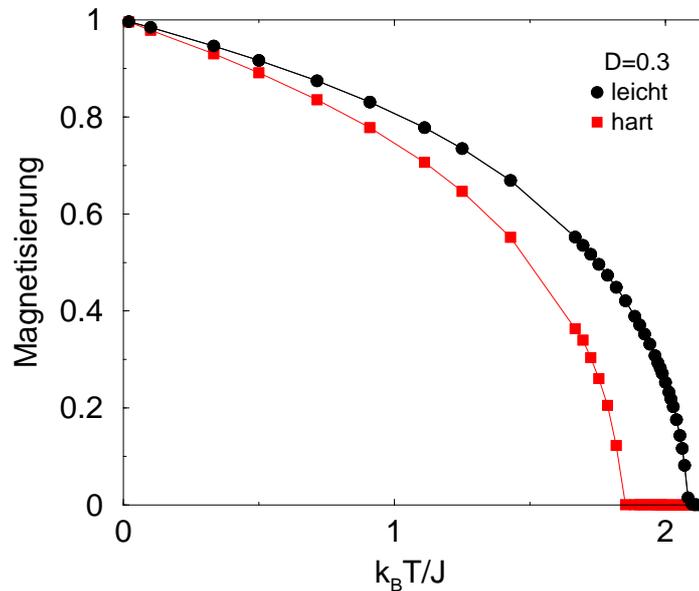


Abbildung 7.1: Temperaturabhängigkeit der leichten bzw harten Achsenrichtungsmagnetisierung einer transversalen Domänenwand. ($\omega/J = 0$, $D/J = 0.3$)

ten $-J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J_{ij}$, in der Domänenwand hat man $-J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J_{ij} \cos \theta \geq -J_{ij}$, wobei θ der Winkel zwischen den magnetischen Momenten ist.

Abb. 7.2 zeigt die kritischen Temperaturen T^* und T_c als Funktion der Anisotropie, die Austauschwechselwirkung wurde dabei konstant gelassen. Man erkennt, daß die Curietemperatur T_c zunimmt, während T^* abnimmt. Allerdings ist der Unterschied zwischen T^* und der Curietemperatur T_c relativ klein für realistische Anisotropien ($D/J \ll 0.1$).

Die Abhängigkeit der Curietemperatur von der Anisotropie läßt sich nun angeben als [68, 96]

$$\frac{k_B T_c}{J} = 2 + \frac{4}{15} \frac{D}{J} + \mathcal{O} \left[\left(\frac{D}{J} \right)^2 \right]. \quad (7.1)$$

Die Abhängigkeit von T^* läßt sich durch

$$\frac{k_B T^*}{J} \approx 2 - 0.53 \frac{D}{J} \quad (7.2)$$

anfitten, so daß sich folgende Differenz der kritischen Temperaturen ergibt:

$$\frac{k_B (T_c - T^*)}{J} \approx 0.8 \frac{D}{J}. \quad (7.3)$$

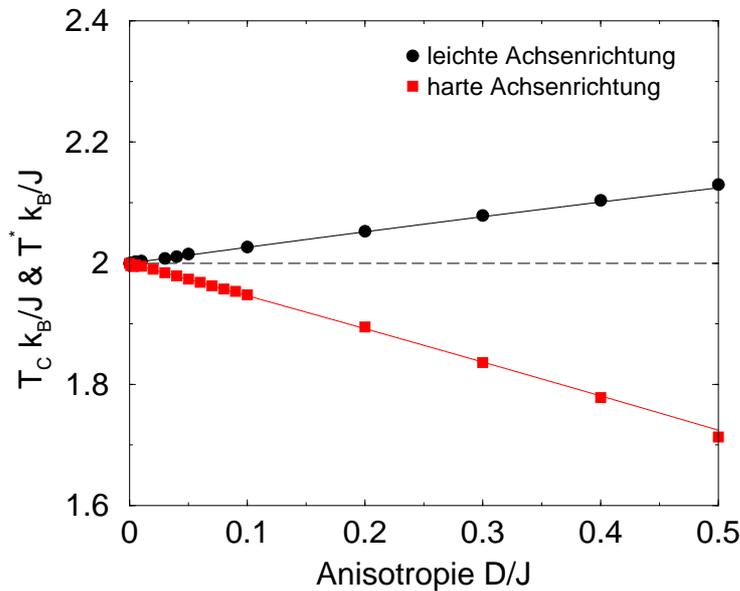


Abbildung 7.2: Abhängigkeit der kritischen Temperaturen T_c und T^* von der Anisotropie. Die numerischen Daten für die Curietemperatur lassen sich mit dem analytischen Ausdruck Gl. 7.1 vergleichen. Die Datenpunkte für T^* lassen sich mit Gl. 7.2 anfitten. ($\omega/J = 0$)

Zur Verstärkung des Effektes, also zur Vergrößerung der Differenz der kritischen Temperaturen, kann man die Abhängigkeit der kritischen Temperatur von der Austauschwechselwirkung ausnutzen. Eine Vergrößerung der Anisotropie bedeutet gleichzeitig eine Verringerung der Domänenwandbreite. Dies hat zur Folge, daß die Winkel zwischen den magnetischen Momenten in der Domänenwand vergrößert werden, was zur Folge hat, daß die magnetischen Momente in der Domänenwand nicht mehr so stark gekoppelt sind. Das Gleiche läßt sich auch durch Zusammendrücken der Domänenwand erreichen. Zusammengedrückte Domänenwände findet man z.B. in nanostrukturierten Drähten, wo z.B. die Breite der Leiterbahn schmäler ist als die Domänenwandbreite der in dieser Leiterbahn befindlichen Domänenwand, deren Breite durch die Materialparameter vorgegeben ist. Dies ist z.B. der Fall wenn sich z.B. an eine breite Leiterbahn eine schmalere anschließt [7] oder in sie Leiterbahnverengungen, sogenannte “notches” eingebracht sind [97, 98].

Abb. 7.3 zeigt T^*/T_c als Funktion der Einschränkung. Die Domänenwandbreite ist dabei größer als die Breite des Systems, so daß eine eingeschränkte Domänenwand vorliegt und die Domänenwandbreite durch die Systembreite festgelegt ist. Mit zunehmender Verengung nimmt die kritische Temperatur T^* immer mehr ab, da gleichzeitig die Austauschkopplung zwischen den magnetischen Momenten abnimmt. Der

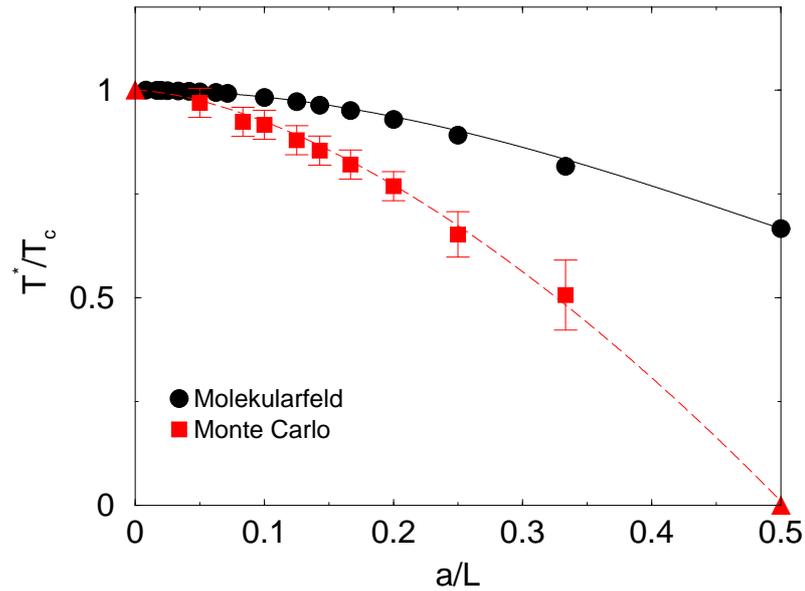


Abbildung 7.3: Abhängigkeit der kritischen Temperatur T^* von der Stärke der Konstriktion. Aufgetragen ist die T^*/T_c als Funktion der inversen Breite der Domänenwand a/L . $a/L = 0.5$ stellt ein Dreischichtsystem dar, mit zwei Schichten mit entgegengesetzter Magnetisierung (Domänen) und einer Zwischenschicht. Die gestrichelte Linie stellt eine Orientierungshilfe dar. Die durchgezogene Linie ist durch $k_B T^*/J = 4/3 + 2/3 \cos(\pi a/L)$ [68] gegeben. ($\omega/J = 0$, $D/J = 0$)

Vergleich der Molekularfeldnäherung mit der Monte Carlo Rechnung zeigt zudem, daß die Molekularfeldnäherung den Effekt unterschätzt. Der Fall des Dreischichtsystems ($a/L = 0.5$), also einer freien Schicht (Domänenwand) zwischen zwei entgegengesetzt orientierten Schichten (den Domänen) ergibt in der Molekularfeldnäherung $1/6$ des ursprünglichen Wertes¹. Zu erwarten ist allerdings aufgrund des Mermin-Wagner Theorems [99]² und der Frustration der mittleren Schicht ein Wert von $T^*/T_c = 0$, was durch die Monte Carlo Simulation bestätigt wird. Nun ist es zwar nicht möglich dies exakt zu zeigen, da man aufgrund des *finite size* Effektes immer eine endliche kritische Temperatur bekommt, dennoch zeigt das asymptotische Verhalten der Ergebnisse der Monte Carlo Simulation ein Verschwinden der kritischen Temperatur T^* auf.

¹In dieser Rechnung wurde die Anisotropie vernachlässigt und die Domänenwand durch Festhalten der Ränder bzw. durch antiperiodische Randbedingungen erzwungen.

²Mermin-Wagner Theorem: Im ein- und zweidimensionalen, isotropen Heisenberg Modell gibt es keine spontane Magnetisierung

Einhergehend mit der zunehmenden Einschränkung der Domänenwand ist nun gleichzeitig eine Änderung der kritischen Exponenten zu beobachten. Abb. 7.4 zeigt die *finite size* Analyse für eine schwach (a) und eine stark (b) zusammengedrückte Domänenwand. Sowohl bei der schwach (a) als auch bei der stark (b) zusammengedrückten Domänenwand lassen sich Abweichungen von den kritischen Exponenten des Heisenberg Modells finden. In beiden Fällen wurden für den Skalenplot die kritischen Exponenten ($\beta = 0.3689$ und $\nu = 0.7112$, [58]) des Heisenberg Modell eingestellt. Aufgetragen ist $ML^{\beta/\nu}$ über $(T - T_C)L^{1/\nu}$, wobei M die Magnetisierung, T die Temperatur und L die Systemlänge ist.

Man sieht, daß es im Fall der schwach eingeschränkten Domänenwand (a) noch zu einem Datenkollaps kommt, allerdings ist dieser nicht mehr perfekt. D.h., es liegen leicht veränderte kritische Exponenten vor, auch ist die Curietemperatur T_C reduziert. Im Fall der stark eingeschränkten Domänenwand (b) läßt sich kein Datenkollaps mehr erkennen. Hier beschreiben die Exponenten des Heisenberg Modells nicht mehr das kritische Verhalten. Auch stimmt die sich in diesem Fall aus dem *finite size scaling* ergebende kritische Temperatur nicht mehr. Es läßt sich zwar ein Datenkollaps erzwingen und so die kritische Temperatur bestimmen, allerdings sind die kritischen Exponenten in diesem Fall wenig aussagekräftig, da sie sich zu keiner Universalitätsklasse zuordnen lassen und lediglich einen Crossover-Effekt zeigen.

Bis jetzt wurde nur der Effekt unterschiedlicher kritischer Temperaturen diskutiert ohne zu hinterfragen, welche Auswirkungen dies auf die Spinstruktur hat. Dies soll nun nachgeholt werden.

Wie bereits einleitend gesagt, liegen im Fall einer transversalen Domänenwand zwei Magnetisierungsrichtungen vor, also zwei Richtungen in denen die magnetischen Momente orientiert sein können. Mit zunehmender Temperatur nimmt die Magnetisierung in senkrechter Richtung zur leichten Achse schneller ab und verschwindet bereits bei $T^* < T_c$. Dies bedeutet, daß ein Phasenübergang von einer transversalen Domänenwand ($T = 0K$) über eine elliptische Wand ($0 < T < T^*$) hin zu einer linearen Domänenwand ($T^* \leq T \leq T_c$) stattfindet. Bei der transversalen Domänenwand haben die magnetischen Momente in den Domänen sowie in der Domänenwand den gleichen Betrag, d.h. die Magnetisierungen sind gleich. Bei einer elliptischen Wand ist die Magnetisierung in leichter Achsenrichtung, also in den Domänen, größer als die Magnetisierung in senkrechter Magnetisierungsrichtung. Im Fall der linearen Wand liegt nur noch in leichter Achsenrichtung eine Magnetisierung vor, welche ungleich Null ist.

Betrachtet man stellvertretend für die transversale Domänenwand eine Blochwand längs einer linearen Kette, so sieht man, wenn man längs der linearen Kette schaut, daß die magnetischen Momente einen Kreis beschreiben, Abb. 7.5. Im Fall der elliptischen Wand fluktuieren die magnetischen Momente um ihre Ruhelage, so daß man die zeitliche Mittelung, also die Magnetisierung betrachten muß. In diesem Fall wird eine Ellipse beschrieben, da die Magnetisierung in der Wand kleiner ist als in den Domänen. Im Fall der linearen Wand liegt nur noch eine Magnetisierungsrichtung

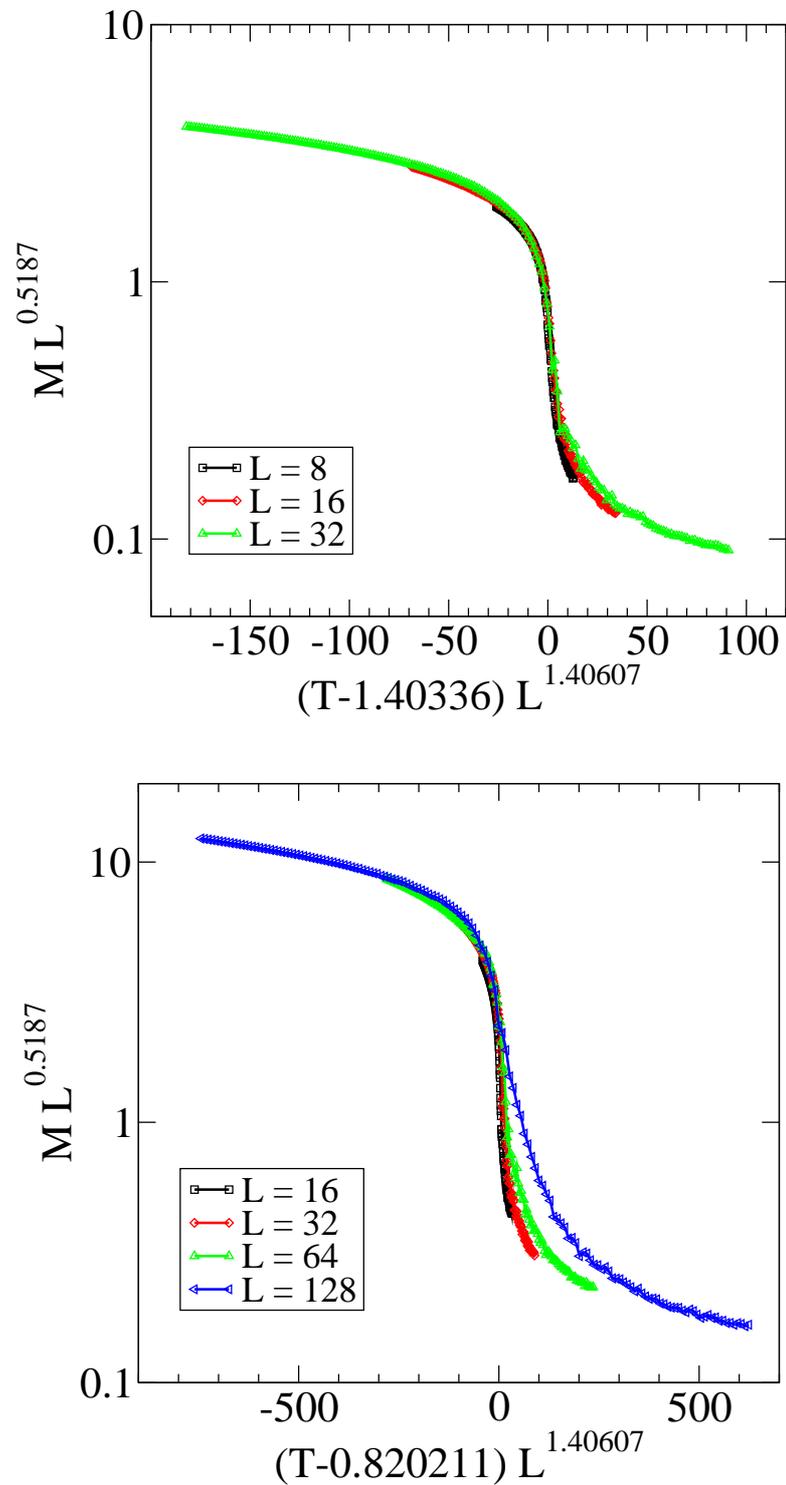


Abbildung 7.4: *finite size scaling* Analyse zur Bestimmung des kritischen Verhaltens zusammengesetzter Domänenwände: (a) schwach zusammengesetzte Domänenwand ($L = 21$) und (b) stark zusammengesetzte Domänenwand ($L = 4$).
 $(\omega/J = 0, D/J = 0)$

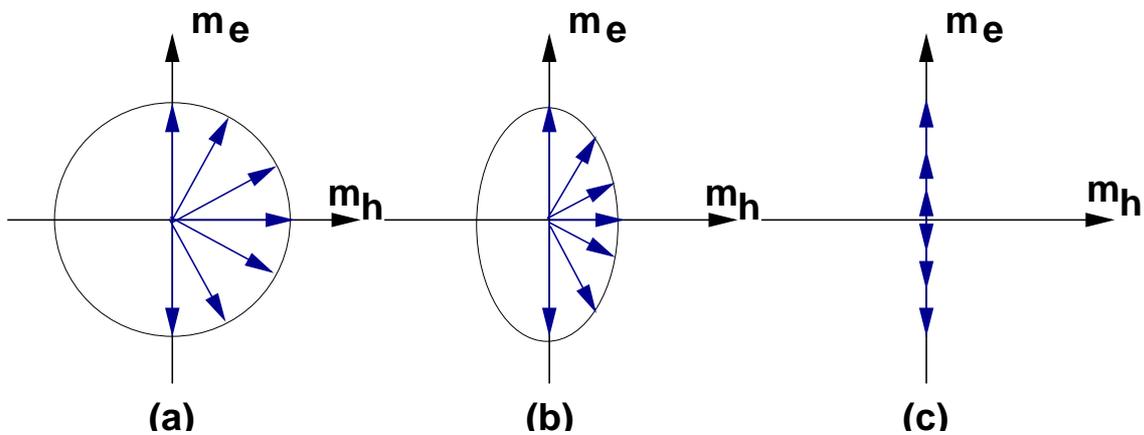


Abbildung 7.5: Domänenwandformen einer transversalen Domänenwand: (a) Blochwand ($T = 0$), (b) elliptische Domänenwand ($T < T^*$), (c) lineare Domänenwand ($T \geq T^*$)

vor, so daß man nur noch einen “geraden Strich” erkennt.

Die Abbildungen 7.6 und 7.7 zeigen schematisch eine elliptische bzw. eine linea-

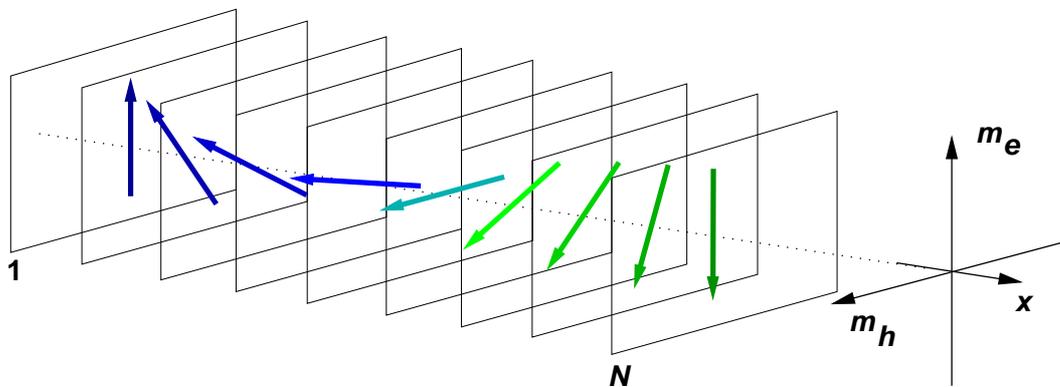


Abbildung 7.6: Elliptische Domänenwand

re Domänenwand. Die fehlende senkrechte Magnetisierungskomponente der linearen Domänenwand ist deutlich zu erkennen.

Erstmals haben sich dabei L. N. Bulaevskiĭ und V. L. Ginzburg [94, 95] mit diesem Thema auseinandergesetzt im Rahmen der thermodynamischen Betrachtung von Domänenwänden mittels Ginzburg-Landau Theorie. Die Systeme sind dabei als unendlich ausgedehnt zu betrachten und nicht wie in dem hier betrachteten Fall endlich.

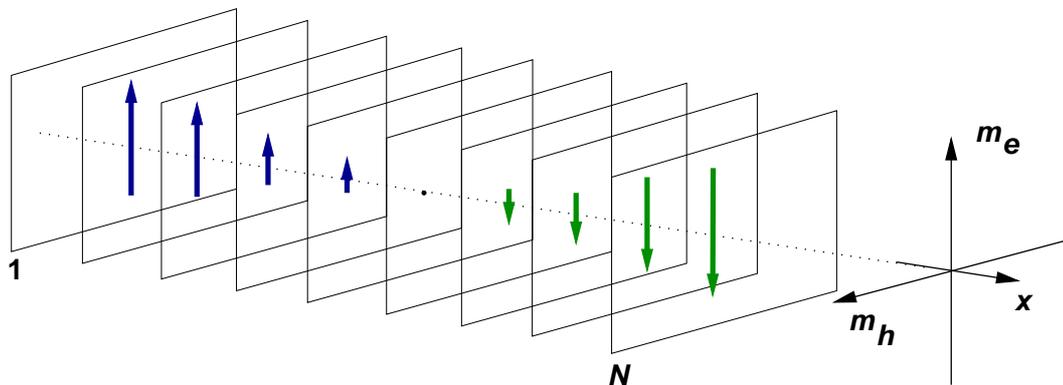


Abbildung 7.7: Lineare Domänenwand

D. Garanin hat sich ebenfalls mit der Thermodynamik von Domänenwänden beschäftigt, wobei ihn im wesentlichen die Dynamik interessiert hat [100, 101]. Darauf soll in einem späteren Abschnitt 7.1.3 genauer eingegangen werden.

Einen Hinweis auf unterschiedliche Magnetisierungen findet man in der Arbeit von F. Janak [81], der transversale Domänenwände mittels Spinwellentheorie untersucht hat. Janak zeigt, daß die Spinwellentheorie bereits einen Hinweis auf ein unterschiedliches Verhalten der beiden Magnetisierungskomponenten gibt. Dies ist um so bemerkenswerter, da die Spinwellentheorie eine Theorie ist die nur für tiefe Temperaturen Gültigkeit besitzt, dort unterscheidet sich aber die Magnetisierung in leichter bzw. in senkrechter Achsenrichtung kaum noch voneinander. Der Korrekturterm von Janak sollte somit auch nur eine kleine Abweichung darstellen.

Das am Beispiel der transversalen Domänenwand Diskutierte läßt sich nun auch auf andere Domänenwandstrukturen wie der Vortexdomänenwand übertragen.

7.1.2 Vortexdomänenwand

Im Fall der transversalen Domänenwand sorgt die Dipol-Dipol Wechselwirkung für eine zusätzliche Anisotropie, während bei der Vortexdomänenwand durch die Dipol-Dipol Wechselwirkung im Zusammenspiel mit der Austauschwechselwirkung ein Wirbel (*Vortex*) erzeugt wird. Da mit diesem Wirbel eine radiusabhängige Domänenwandbreite einhergeht ist zu erwarten, daß die Magnetisierung in der Vortexdomänenwand schneller als in den Domänen und gleichzeitig innerhalb der Domänenwand unterschiedlich schnell abnimmt. In der Tat findet man, daß die Magnetisierung in der Mitte des Wirbels am schnellsten abnimmt. Dies korrespondiert mit der kleinsten Domänenwandbreite, also mit den größten Winkeln zwischen zwei benachbarten magnetischen Momenten. Abb. 7.8 zeigt die Magnetisierung als Funktion des Ortes x . Dabei wurde der Schnitt durch den Draht genau in

der Domänenwandmitte durchgeführt.

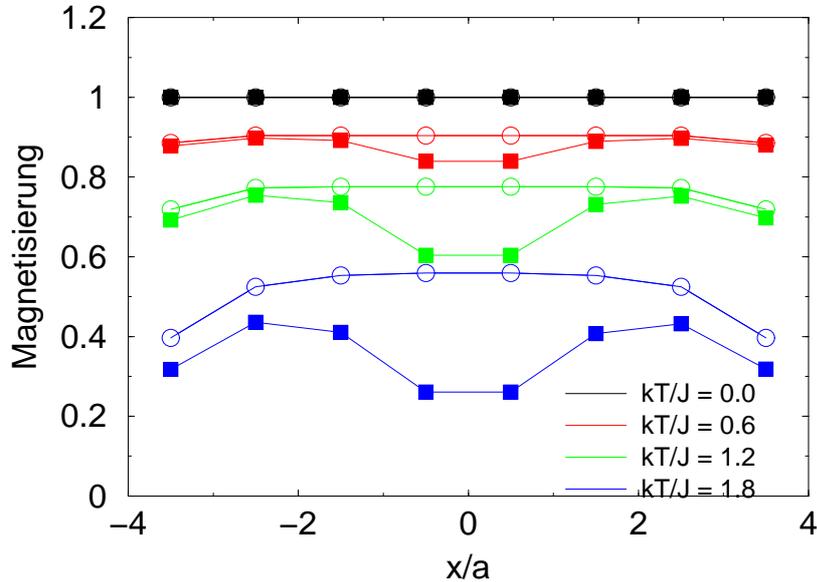


Abbildung 7.8: Magnetisierung als Funktion des Ortes: Die offenen Kreise stellen den Querschnitt des Drahtes durch eine der zwei Domänen dar, die gefüllten Quadrate den Querschnitt durch die Domänenwandmitte. ($\omega/J = 0.2$, $D/J = 0.05$)

Eine genaue Untersuchung der Temperaturabhängigkeit von Vortexstrukturen läßt sich anhand eines einfacheren Systems, einer zylindrischen Vortexstruktur, besser bewerkstelligen (Kapitel 8). Zuvor soll jedoch der Einfluß der Temperatur auf die Bewegung von Domänenwänden diskutiert werden.

7.1.3 Temperaturabhängigkeit der Domänenwandgeschwindigkeit

Führt man Langevin-Dynamik Simulationen an bewegten Domänenwänden durch so stellt man fest, daß dies einige Schwierigkeiten mit sich bringt. Bereits die Untersuchung statischer Domänenwände mittels Langevin-Dynamik Simulationen stellt sich als schwierig heraus, da die Domänenwand thermisch zu driften beginnt. Eingeschränkte Domänenwände erweisen sich da als weniger problematisch, wobei es hier immer noch zur Rotation der magnetischen Momente in der Domänenwand, um die Längsachse, kommen kann.

Im Fall der bewegten Domänenwand besteht die Problematik im wesentlichen im Rauschen selbst. Das Rauschen macht eine zeitliche Mittelung zur Bestimmung der Magnetisierung notwendig. Dies ist aber aufgrund der Dynamik der Domänenwand

nicht möglich, da in diesem Fall über die Bewegung mitgemittelt wird.

Um die Geschwindigkeit der Domänenwand zu bestimmen ist jetzt folgendes Vorgehen nötig. Die Simulation wird wie gewohnt durchgeführt, jedoch mit dem Rauschen, also mit Berücksichtigung der Temperatur. Diese Simulation wird mehrfach wiederholt, wobei bei jedem Durchlauf der Ort der Domänenwand als Funktion der Zeit bestimmt wird. Aus den Kurven wird anschließend die Geschwindigkeit ermittelt und diese über die Anzahl der Durchläufe gemittelt. Somit erhält man dann eine mittlere Geschwindigkeit für einen Temperaturwert. Dieses Vorgehen ist allerdings nur für niedrige Temperaturen möglich, da bei höheren Temperaturen eine Bestimmung des Ortes der Domänenwand unmöglich ist. Für hohe Temperaturen und insbesondere für Temperaturen in der Nähe der Curietemperatur wäre es notwendig, andere Simulationen zu verwenden. Evt. eignet sich der Landau-Lifshitz-Bloch Algorithmus, bei dem die Landau-Lifshitz-Bloch Gleichung [38, 100, 102] gelöst wird. In diesem Fall geht die Änderung der Magnetisierung durch die Berechnung mittels Molekularfeldnäherung ein.

Im Fall der transversalen bzw. Vortexdomänenwand ist die Geschwindigkeit für den Bereich tiefer Temperaturen in Abb. 7.9 dargestellt. Die Abnahme der Geschwindig-

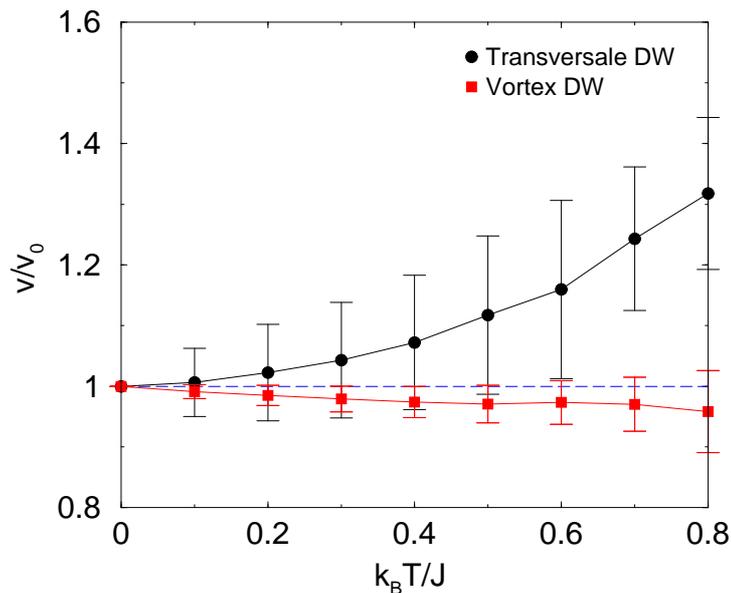


Abbildung 7.9: Temperaturabhängigkeit der Domänenwandgeschwindigkeit. Die Geschwindigkeiten beziehen sich auf die Geschwindigkeit v_0 bei $T = 0$.

(Zylinder: $d/a = 8$, $\mu_S B/J = 0.1$, $\alpha = 1$, transversale DW: $\omega/J = 0$, $D/J = 0.3$, Vortex DW: $\omega/J = 0.2$, $D/J = 0.05$)

keit im Fall der Vortexdomänenwand ist auf die Anregung thermischer Spinwellen

und deren Wechselwirkung mit der Domänenwand zurückzuführen.

Bei der transversalen Domänenwand wurde ein System mit nur einer leichten Anisotropieachse betrachtet, so daß es zu einer Präzessionsbewegung kommt. Durch die Temperatur kommt es zu einer immer direkteren Ummagnetisierung, so daß die Geschwindigkeit zunimmt. Dies kommt daher da die Geschwindigkeitsgleichung von Slonczewski eine untere Grenze darstellt und voraussetzt, daß die magnetischen Momente präzidieren. Würde man eine transversale Domänenwand in einem System mit biaxialer Anisotropie, also mit einer zweiten z.B. harten Achse, betrachten, so würde keine Präzession auftreten und die Geschwindigkeit mit zunehmender Temperatur abnehmen. Die Argumentation wär dann analog zu der bei der Vortexdomänenwand.

Es bleiben an dieser Stelle noch zwei Dinge anzumerken. Zum einen sind die Geschwindigkeiten in Abb. 7.9 derart angepaßt worden, daß man sie in ein Diagramm auftragen kann. Das bedeutet, die Geschwindigkeit der Vortexdomänenwand viel größer als die Geschwindigkeit der transversalen Domänenwand ist. Ein Vergleich der beiden Geschwindigkeiten wurde dabei erst durch die gewählte Austragung möglich. Damit erscheint aber die Änderung der Geschwindigkeit der transversalen Domänenwand viel größer bzw. die Änderung der Geschwindigkeit der Vortexdomänenwand viel kleiner, als sie in Wirklichkeit ist.

Die zweite Anmerkung betrifft die Tatsache, daß es äußerst schwierig ist mittels Langevin-Dynamik die Dynamik von Domänenwänden zu untersuchen, so daß eine genaue Untersuchung mittels anderer Methoden ratsam erscheint. Eine solche Untersuchung wurde bereits von D. A. Garanin durchgeführt [38, 100, 102], der mittels der bereits erwähnten Landau-Lifshitz-Bloch Gleichung die Dynamik von transversalen Domänenwänden untersuchte, wobei er eine direkte Ummagnetisierung aufgrund einer biaxialen Anisotropie annahm. Garanin fand zunächst eine Abnahme der Mobilität, also der Geschwindigkeit, mit zunehmender Temperatur. In der Nähe der Curietemperatur fand er zudem ein Wiederanstieg der Mobilität. Die Mobilität steigt dabei ab der Temperatur T^* wieder an, wo der Phasenübergang von der elliptischen zur linearen Domänenwand vollzogen wurde. D.h., die Mobilität der elliptischen Domänenwand nimmt mit zunehmender Temperatur immer mehr ab, die der linearen Wand hingegen nimmt zu.

8 Thermisch aktivierte Vortexstrukturen

In Kapitel 7.1.2 wurde damit begonnen, die Temperaturabhängigkeit von Wirbelstrukturen anhand der Vortexdomänenwand zu untersuchen. Eine etwas einfachere und damit leichter zu untersuchende Struktur stellt die zylindrische Wirbelstruktur dar (siehe Abb. 8.1). Im allgemeinen hat man dabei einen Wirbel (*Vortex*),

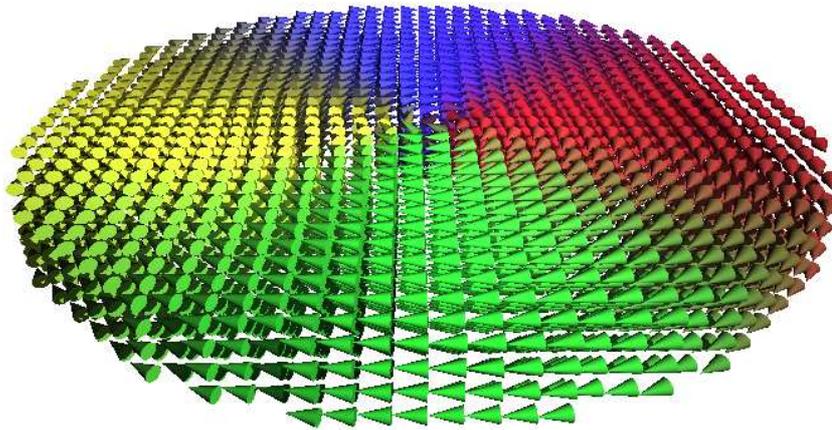


Abbildung 8.1: Zylindrische Wirbelstruktur

der den ganzen Zylinder durchzieht und einen *Vortexcore*, also einen Bereich in der Mitte des Wirbels, in dem die magnetischen Momente aus der Wirbelebene herauszeigen (Abb. 8.2). Zur Beschreibung läßt sich folgender analytischer Ansatz (in Zylinderkoordinaten) angeben [8, 103]

$$S_r = 0 \quad , \quad (8.1)$$

$$S_\phi = \sqrt{1 - S_z^2} \quad , \quad (8.2)$$

$$S_z = c \cdot \exp\left(-\frac{r^2}{d_{ex}^2}\right) + (1 - c) \cdot \exp\left(-\frac{r^2}{(2d_{ex})^2}\right) \quad . \quad (8.3)$$

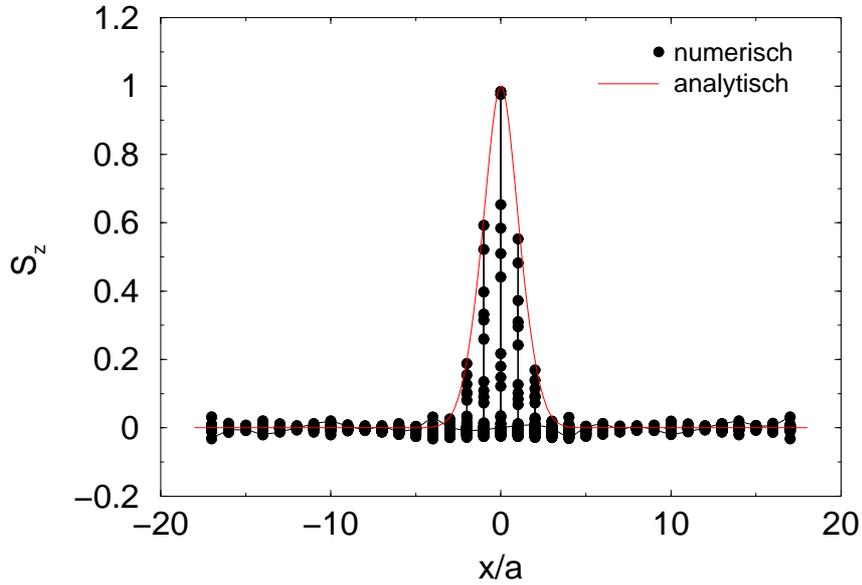


Abbildung 8.2: Schnitt durch die zylindrische Wirbelstruktur mit *Vortexcore*. Analytische Kurve ist durch Gl. 8.3 gegeben. ($\omega/J = 0.2$, $D/J = 0$)

Der freie Parameter c wird dabei mittels des Ritz'schen Verfahrens bestimmt:

$$c \approx -0.188 + \frac{0.708}{1 + 0.2p + 0.0278p^2} . \quad (8.4)$$

r ist dabei der Radius des Zylinders, $p = h/d_{ex}$ die reduzierte Höhe, und

$$d_{ex} = \sqrt{\frac{Ja^2}{6\omega\zeta(3)}} \quad (8.5)$$

die Austauschlänge mit der Riemannschen Zetafunktion $\zeta(3) \approx 1.2$.

Die Ursache solcher Wirbelstrukturen ist das Zusammenspiel von Austausch- und Dipol-Dipol Wechselwirkung. Die Dipol-Dipol Wechselwirkungsenergie wird dabei durch den sogenannten Ringschluß minimiert. D.h., die magnetischen Momente ordnen sich so an, daß sie alle hintereinander aufgereiht sind, wodurch Streufelder vermieden werden und der dipolare Anteil an der Gesamtenergie minimiert wird. Für die Austauschwechselwirkung ist es günstig, wenn die magnetischen Momente parallel orientiert sind. Dabei spielt es keine Rolle, ob die magnetischen Momente parallel hintereinander oder parallel nebeneinander aufgereiht sind. Die Wirbelstruktur hat dabei einen größeren Energiebeitrag kommend von der Austauschwechselwirkung, als ein Zylinder mit gleicher Orientierung aller magnetischen Momente. Allerdings liegt durch die Absenkung des dipolaren Anteils an der Energie bei der Bildung des

Wirbels, insgesamt eine energetisch günstigere Struktur vor.

Abhängig vom Radius des Zylinders sind nun unterschiedlich viele magnetische Momente an dem Ringschluß beteiligt. Innerhalb des *Vortexcores* sind nur noch wenige magnetische Momente an der Bildung des Ringes beteiligt, so daß sie dabei praktisch nicht mehr hintereinander orientiert sind. Zuletzt wären es nur noch vier magnetische Momente, welche jeweils in einem Winkel von 90° zueinander orientiert sind. Dies ist aber aus Sicht der Austauschwechselwirkung, die in diesem Fall Null wäre, als auch aus der Sicht der Dipol-Dipol Wechselwirkung energetisch äußerst ungünstig. Um die Energie des Systems zu minimieren, werden die magnetischen Momente aus der Ebene heraus gedreht. Hat man zudem noch ein magnetisches Moment genau in der Mitte des Zylinders, so steht dieses senkrecht auf der Wirbelebene. Da der Zylinder nicht nur aus einer Schicht besteht, sondern aus vielen Schichten, die alle den Wirbel ausbilden, stehen die magnetischen Momente genau in der Zylindermitte hintereinander aufgereiht, was wiederum die Dipol-Dipol-Wechselwirkungsenergie und die Austauschwechselwirkungsenergie minimiert. Es bleibt noch anzumerken, daß die Richtung der Zirkulation, also der Drehsinn des Wirbels, sowie die Orientierung der magnetischen Momente im *Vortexcore* zufällig sind.

Betrachtet man anstelle eines Zylinders eine zweidimensionale Filmstruktur, so gibt es neben dem Zusammenspiel von Dipol-Dipol Wechselwirkung und Austauschwechselwirkung noch eine weitere Möglichkeit zur Ausbildung von Wirbelstrukturen, die Austauschanisotropie. Abhängig von der Stärke der Austauschanisotropie findet man zudem einen Übergang von einer *out-of-plane Vortexstruktur* zu einer *in-plane Vortexstruktur* [104]. Bei der *out-of-plane Vortexstruktur* handelt es hierbei um die bereits oben beschriebene Struktur eines Wirbels mit einer senkrecht auf der Wirbelebene stehenden Magnetisierungskomponente in der Mitte des Wirbels. Bei der *in-plane Vortexstruktur* liegt ein Wirbel vor, ohne daß eine Magnetisierungskomponente senkrecht auf der Wirbel- bzw. Filmebene existiert.

8.1 Gleichgewicht: lokale Molekularfeldnäherung

Betrachtet man die Thermodynamik eines *out-of-plane Vortex* mittels lokaler Molekularfeldnäherung, so findet man das gleiche Verhalten wie im Fall der Vortexdomänenwand. Abb. 8.3 zeigt die Magnetisierung als Funktion der Temperatur für die beiden auftretenden Fälle, daß die Mitte des Wirbels sich genau zwischen den Gitterplätzen befindet (Zylinderdurchmesser: 32 magn. Momente) oder genau mit einem besetzten Gitterplatz zusammenfällt (Zylinderdurchmesser: 35 magn. Momente). In dem Fall des Zylinderdurchmessers von 35 magnetischen Momenten hat man genau ein magnetisches Moment in der Zylindermitte, welches senkrecht auf dem Wirbel steht. Abb. 8.3a zeigt, daß die senkrechte Magnetisierungskomponente, also die Magnetisierungskomponente, welche nur im *Vortexcore* auftritt, bereits bei einer kritischen Temperatur T^* verschwunden ist, bevor die in der Ebene orientierte

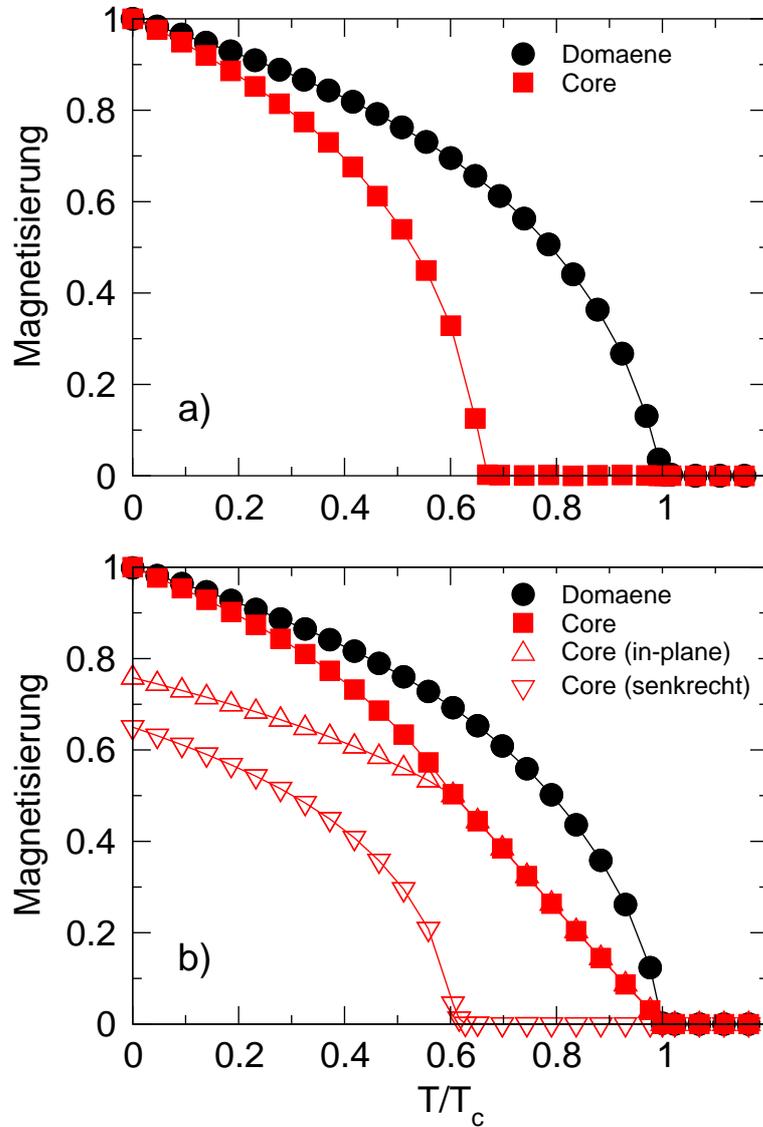


Abbildung 8.3: Magnetisierung als Funktion der Temperatur einer zylindrischen *Vortexstruktur*: (a) Zylinderdurchmesser: 35 magn. Momente, (b) Zylinderdurchmesser: 32 magn. Momente. Dargestellt ist jeweils die Magnetisierung in dem Bereich außerhalb des *Vortexcores* ("Domäne") und im Zentrum des Zylinders (*Vortexcore*). In (b) sind zudem die beiden Komponenten der Magnetisierung des *Vortexcores* aufgetragen (offene Symbole). ($\omega/J = 0.2$, $D/J = 0$)

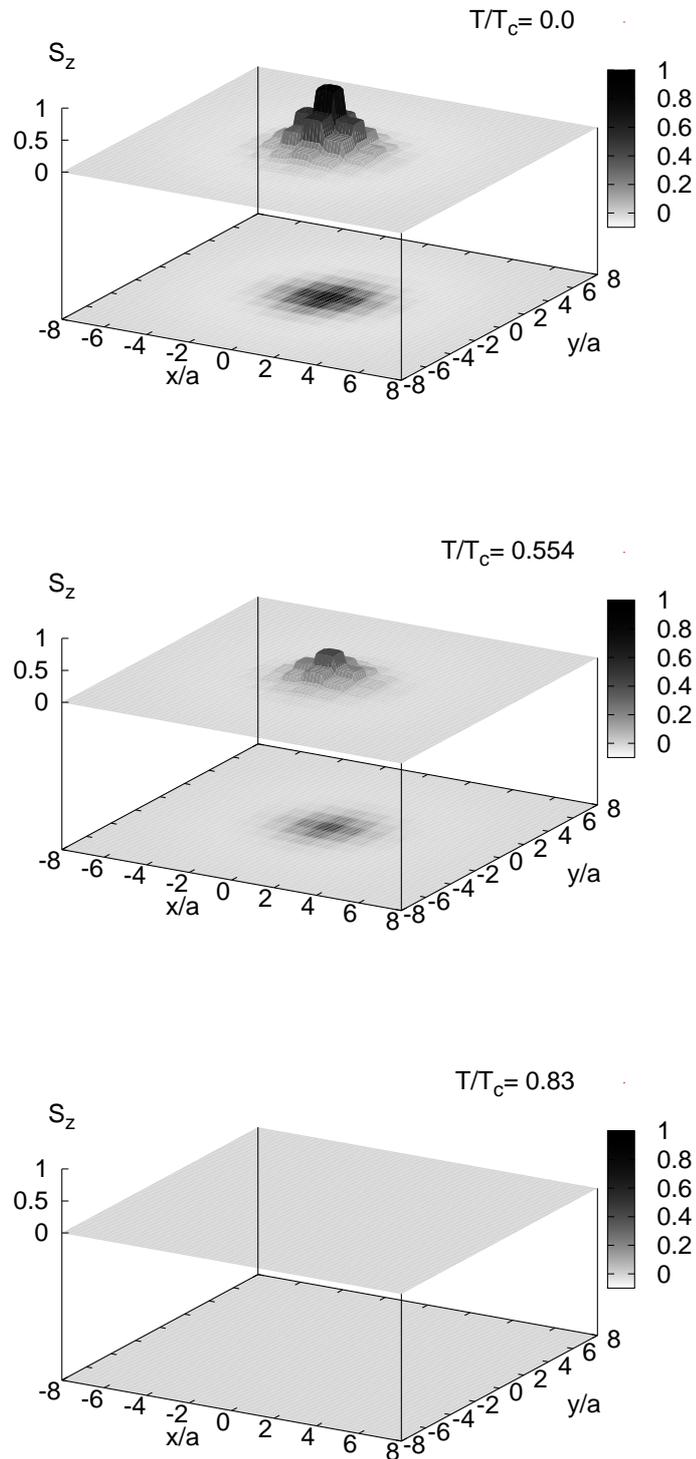


Abbildung 8.4: Magnetisierung des *Vortexcores* als Funktion der Temperatur. Dargestellt ist die senkrechte Magnetisierungskomponente bei drei Temperaturen: $T/T_c = 0$, $T^*/T_c > T/T_c = 0.554$ und $T^*/T_c < T/T_c = 0.83$. ($\omega/J = 0.2$, $D/J = 0$)

Magnetisierungskomponente bei der Curietemperatur ebenfalls verschwindet. Bei der Simulation wurde hierbei die senkrechte Magnetisierung $M_{\perp} = M_z$ des zentralen magnetischen Momentes mit der Magnetisierung eines in der Wirbelebene orientierten magnetischen Momentes verglichen. Dabei wurde zunächst die Magnetisierung an jedem Gitterplatz bestimmt und dann über die Schichten entlang der Zylinderachse gemittelt. Die *in-plane* Magnetisierung ist dabei gegeben durch $M_{\parallel} = \sqrt{M_x^2 + M_y^2}$, wobei M_{η} $\eta \in \{x, y, z\}$ die Komponenten der Magnetisierung sind, die sich aus der zeitlichen Mittelung der magnetischen Momente ergeben $\mathbf{M} = \langle \mathbf{S} \rangle$.

Abb. 8.3b zeigt den korrespondierenden Fall des Zylinders mit 32 magnetischen Momenten im Durchmesser. Hier gibt es kein zentrales magnetisches Moment, so daß die vier am nächsten zur Mitte liegenden magnetischen Momente betrachtet werden. Da diese nicht senkrecht auf dem Wirbel stehen, sondern verkippt aus der Wirbelebene herauszeigen, läßt sich diesen magnetischen Momenten eine Komponente in der Ebene und eine senkrecht aus der Ebene herauszeigende Magnetisierungskomponente zuordnen¹. Abb. 8.3b zeigt, daß die senkrechte Magnetisierung M_{\perp} zuerst verschwindet und dann die Magnetisierung in der Ebene M_{\parallel} . Dies ist analog zu dem Fall des Zylinders mit 35 magnetischen Momenten Durchmesser. Man erkennt zudem, daß die in der Ebene liegende Magnetisierungskomponente der magnetischen Momente des *Vortexcores* zunächst nur leicht, und sobald die senkrechte Magnetisierungskomponente verschwunden ($T > T^*$) ist, stärker abnimmt, um bei der Curietemperatur T_c zu verschwinden. Was man also beobachtet ist ein Übergang von einem *out-of-plane Vortex* hin ($T \leq T^*$) zu einem *in-plane Vortex* ($T > T^*$).

Abb. 8.4 zeigt noch einmal schematisch die senkrechte Magnetisierungskomponente für verschiedene Temperaturen. Dargestellt ist nur der Bereich des *Vortexcores*, da außerhalb diese Magnetisierungskomponente überall Null ist.

8.2 Dynamik: Superparamagnetisches Verhalten

Die bisherigen Untersuchungen wurden mittels Molekularfeldnäherung durchgeführt. Nun stellt die Molekularfeldnäherung zum einen nur eine grobe Näherung dar, zum anderen unterschätzt sie die auftretenden Effekte, wie bereits in Kapitel 7.1.1 gezeigt wurde. Deshalb erscheint es notwendig noch eine andere Methode zu verwenden. In diesem Fall wird zusätzlich die stochastische Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung gelöst. Die Motivation hierfür soll kurz begründet werden.

Der *Vortexcore* stellt einen eng begrenzten Bereich dar, in dem die magnetischen Momente in die eine oder andere Richtung senkrecht zur Wirbelebene zeigen können. Dies erinnert stark an Nanopartikel, bei denen sich ein superparamagnetisches Ver-

¹Das gleiche gilt natürlich für alle magnetischen Momente in Bereich des *Vortexcores*, ausgenommen das zentrale magnetische Moment im Fall der Zylinder mit einem Durchmesser ungerader Anzahl magnetischer Momente, z.B. 35

halten² beobachten läßt. Untersucht man diese Nanopartikel mittels einer Molekularfeldrechnung, so wird man dieses Verhalten nicht sehen, da die Molekularfeldnäherung die Eigenschaft hat, in dem Energieextremum zu verweilen in dem sich das System gerade befindet. Generell ist die Molekularfeldnäherung nicht geeignet dynamische Prozesse zu beschreiben. Mit Hilfe der stochastischen Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung hat man aber eine Möglichkeit, sowohl die Dynamik, als auch die Thermodynamik zu untersuchen.

In der Tat findet man das erwartete superparamagnetisches Verhalten des *Vortexco-*

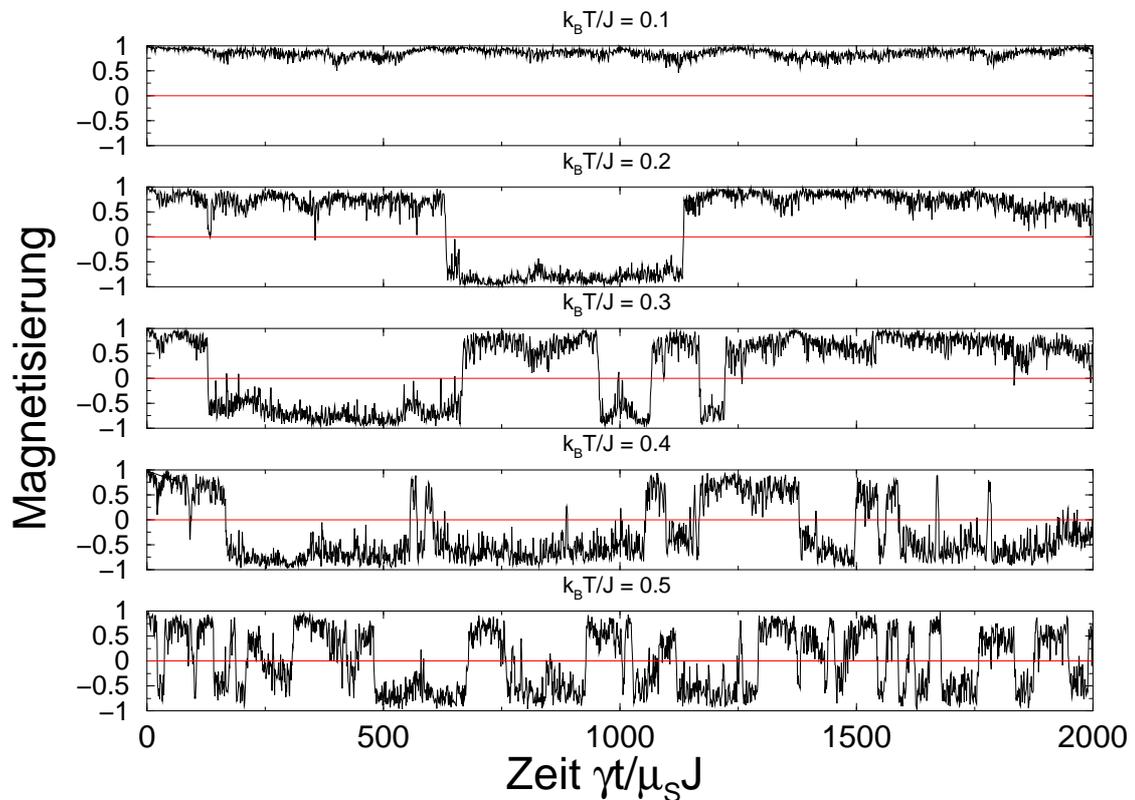


Abbildung 8.5: Superparamagnetisches Verhalten des *Vortexcores*. Dargestellt ist die senkrechte Magnetisierungskomponente des *Vortexcores* als Funktion der Zeit für verschiedene Temperaturen. ($\omega/J = 0.2$, $D/J = 0$, $\alpha = 0.02$)

res. Abb. 8.5 zeigt die senkrechte Magnetisierungskomponente M_{\perp} als Funktion der Zeit für ansteigende Temperaturen. Die einzelnen Punkte sind dabei über 100000

²Von einem superparamagnetischen Verhalten eines Nanoteilchens spricht man, wenn Magnetisierungsrichtung thermischen Fluktuationen folgt, also das Nanoteilchen unkontrolliert ummagnetisiert. Die Ursache hierfür ist, daß die thermische Energie größer ist als die Kristallanisotropie. Diese Erscheinung tritt bei sehr kleinen eindomänen Nanopartikeln auf.

Zeitschritte gemittelt worden. Deutlich zu erkennen ist das Umschalten der Magnetisierung zwischen den beiden Orientierungsrichtungen $M_{\perp} = +1$ und $M_{\perp} = -1$, wobei mit steigender Temperatur die Häufigkeit der Ummagnetisierung steigt. Um die Energiebarriere bestimmen zu können, wurde die Zeit bis zum ersten Um-

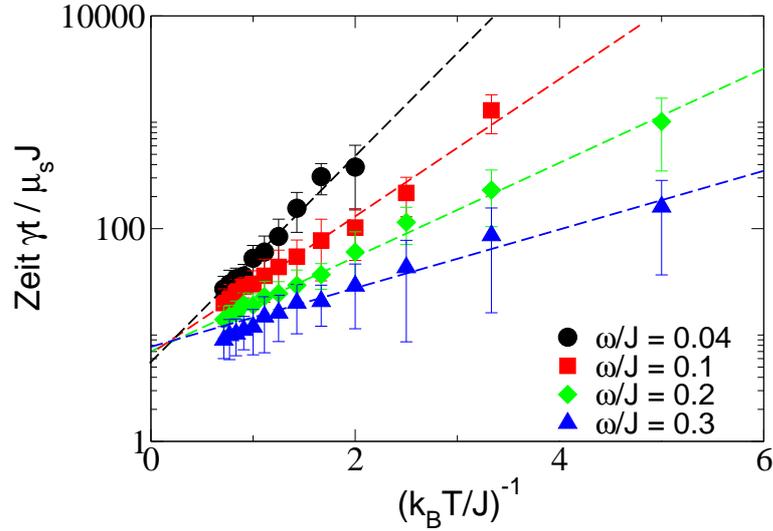


Abbildung 8.6: Zeit bis zum ersten Ummagnetisierungsereignis als Funktion der inversen Temperatur. Bei der Simulation wurde das Verhältnis ω/J variiert, und somit der Radius des *Vortexcores* (Siehe Text). ($D/J = 0$, $\alpha = 0.02$)

magnetisieren, gemittelt über eine Anzahl von 50 Durchläufe, als Funktion der Temperatur bestimmt. Die Simulation wurde dabei für verschiedene Stärken der Dipol-Dipol Wechselwirkung durchgeführt (Abb. 8.6). Zu erkennen ist die Zunahme der Zeit bis zum ersten Ummagnetisieren mit abnehmender dipolaren Stärke ω/J . Dies bedeutet eine Zunahme der Energiebarriere für kleinere ω/J . Gleichzeitig bedeutet eine kleinere dipolare Kopplung eine Vergrößerung des Radius des *Vortexcores* [8]. Dies kann man vergleichen mit dem Verhalten superparamagnetischer Nanopartikel, bei denen die Stabilität ebenfalls mit Verkleinerung des Partikelradius abnimmt. Die Vergrößerung des *Vortexcores* bedeutet auch, daß der Winkel zwischen benachbarten magnetischen Momenten kleiner wird, so daß es zu einer stärkeren Austausch- bzw. Dipol-Dipol Wechselwirkung zwischen diesen beiden magnetischen Momenten kommt, was eine Stabilisierung des Zustandes bedeutet. An dieser Stelle soll angemerkt werden, daß bei den Simulationen keine Anisotropien betrachtet wurden, so daß die Stabilität der einzelnen Zustände nur durch das Zusammenspiel der Dipol-Dipol Wechselwirkung mit der Austauschwechselwirkung bestimmt ist.

Eine Stabilisierung des Zustandes bedeutet aber auch, daß die Energiebarriere, welche überwunden werden muß, um in den Zustand mit entgegengesetzter Orientie-

rung der Magnetisierung im *Vortexcore* zu gelangen, zunimmt. Leider lassen sich nur sehr schwer Rückschlüsse auf die Energiebarriere ziehen, da der Ummagnetisierungsmechanismus unklar ist. Es wird allerdings davon ausgegangen, daß es zu einem kohärenten Ummagnetisieren der magnetischen Momente im *Vortexcore* kommt, mit einem Zwischenzustand bei dem alle magnetischen Momente sich in der Ebene befinden und einen Wirbel bilden, also einen *in-plane Vortex*-Zustand. Dies würde bedeuten, daß die Energiebarriere gegeben ist durch die Energiedifferenz der Energien des *out-of-plane Vortex* und des *in-plane Vortex* [105].

Genauere Aussagen lassen sich nun mittels Langevin-Dynamik nicht machen, da zeitlich gemittelt werden muß, um die Magnetisierung zu bestimmen. Dadurch wird unter Umständen auch über die Dynamik mitgemittelt. Andererseits sind sowohl Momentaufnahmen, als auch die Bilder der zeitlich gemittelten Strukturen, derart verwechselt, daß aus ihnen keine Rückschlüsse auf den Ummagnetisierungsmechanismus zu gewinnen sind. Einzig ein Rauslaufen des *Vortexcores* aus dem Zylinder ist auszuschließen. Allerdings beobachtet man ein thermisches Driften des *Vortexcores*, doch handelt es sich hierbei um stochastische Bewegungen, um die Ruhelage in der Mitte des Zylinders.

Für die Bestimmung des Zeitpunktes der Ummagnetisierung spielt dieser Effekt keine Rolle. Der Grund hierfür ist die geordnete Struktur, mit der die Simulation gestartet wird und die Tatsache, daß ein Ummagnetisieren der senkrechten Magnetisierung sich als statistisch wahrscheinlicher erwies als das Wegdriften des gesamten *Vortexcores*. Die Driftbewegungen des *Vortexcores* lassen sich bei der Auftragung der senkrechten Magnetisierung M_{\perp} über der Zeit als kontinuierliche Abnahme von M_{\perp} beobachten. Die abrupten Übergänge von $M_{\perp} = +1$ nach $M_{\perp} = -1$, sind die Ummagnetisierungsprozesse des *Cores* (siehe Abb. 8.5).

Eine weitergehende Untersuchung z.B. mit der Landau-Lifshitz-Bloch Gleichung erscheint erfolgversprechend um weitergehende Erkenntnisse zu liefern, da sich hiermit klären ließe, wie die magnetischen Momente ummagnetisieren, was einen Rückschluß auf die Energiebarriere zuließe. Dies setzt aber die Klärung der Richtigkeit dieser Methode voraus, was allerdings noch nicht vollständig geschehen ist.

9 FePt Nanopartikel

Die rasante technologische Entwicklung der letzten Jahre hat zu einer stetig wachsenden Speicherdichte bei gleichzeitig immer kleiner werdenden Speichermedien geführt. Allerdings scheint es notwendig, einige Konzepte zu ändern, um das stetige Wachstum bei gleichzeitig immer geringeren Zugriffszeiten auf Daten auch zukünftig zu gewährleisten.

Ein Konzept ist die Aufgabe der herkömmlichen mechanisch betriebenen Festplatten zu Gunsten nanostrukturierter Speichermedien. Der am meisten Erfolg versprechende Weg dabei ist, solche Speichermedien unter Verwendung selbstorganisierter Nanopartikel herzustellen [9, 10]. Der Vorteil gegenüber lithographischen Methoden liegt klar auf der Hand, da man auf diese Weise eine höhere Speicherdichte erreicht. Nun führt aber eine stetige Verringerung der Partikelgröße, um eine höhere Speicherdichte zu erreichen, zu Problemen, da die Magnetisierungsrichtung der Partikel thermisch nicht stabil bleibt. Die Magnetisierung des Nanoteilchens fängt an zu fluktuieren. Dieses Verhalten nennt man Superparamagnetismus. Aus diesem Grund bedarf es Nanopartikel aus Materialien mit einer hohen Anisotropie, um eine größere thermische Stabilität zu gewährleisten. Zu diesen Materialien gehört *FePt*, welches in der L_{10} Phase eine besonders große Anisotropie aufweist.

In diesem Kapitel sollen *FePt* Nanopartikel mittels Langevin-Dynamik untersucht werden. Die Materialparameter entstammen in diesem Fall nicht aus der Literatur oder sind Experimenten entliehen, sondern kommen von einer *Ab-Initio* Rechnung, in der explizit die Materialparameter, wie die langreichweitige Austauschkopplung, berechnet wurde. Die *Ab-Initio* Rechnungen wurden dabei innerhalb einer Kooperation mit dem Festplattenhersteller *Seagate Research* von O. Mryasov berechnet [106].

Der Aufbau dieses Kapitels ist wie folgt, zunächst werden die *FePt* Nanopartikel charakterisiert und die Anwendbarkeit des Néel-Brown Gesetzes überprüft. Im zweiten und dritten Teil werden dann die Methode des lokalen Molekularfeldes und die Methode der Greenfunktionen auf das *FePt* System angewendet. Im Fall der Greenfunktionsmethode wird allerdings ein ausgedehntes Bulksystem und keine Nanopartikel betrachtet. Das Kapitel beginnt mit einer Beschreibung der verwendeten effektiven Heisenberg Hamiltonfunktion.

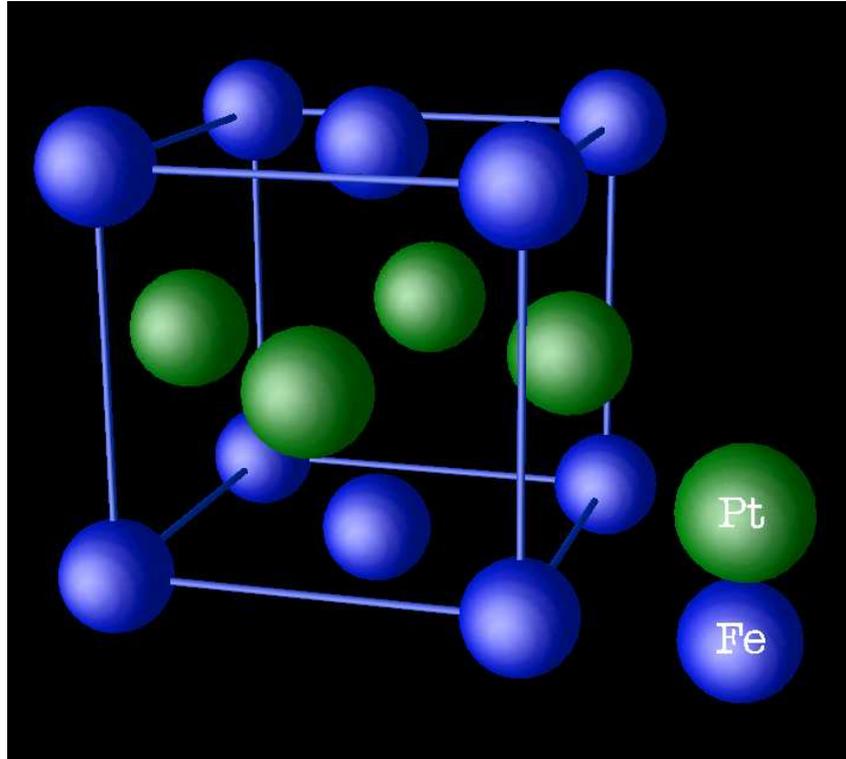


Abbildung 9.1: Schematische Darstellung des *FePt* Kristalls in der L_{10} Phase.

9.1 Die effektive FePt Heisenberg Hamiltonfunktion

Abb. 9.1 zeigt einen Teil eines *FePt*-Kristalls in der L_{10} Phase. Die zugehörige Hamiltonfunktion ist gegeben durch:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{FePt} = & - \sum_{i,j} \frac{J_{ij}}{2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i,k} \frac{J_{ik}}{2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k - \sum_{l,k} \frac{J_{lk}}{2} \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_k \\
 & - D_{Fe} \sum_i (S_i^z)^2 - D_{Pt} \sum_k (S_k^z)^2 \\
 & - \mu_{Fe} \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i - \mu_{Pt} \mathbf{B} \cdot \sum_k \mathbf{S}_k \\
 & - \omega_{mn} \sum_{m < n} \frac{3 (\mathbf{S}_m \cdot \mathbf{e}_{mn}) (\mathbf{e}_{mn} \cdot \mathbf{S}_n) - \mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n}{r_{mn}^3}
 \end{aligned} \tag{9.1}$$

Dabei wurde die Konvention benutzt, daß i und j die Gitterplätze des Eisens *Fe*, k und l die Gitterplätze des Platins *Pt* und m und n sowohl die Gitterplätze des Eisens als auch des Platins symbolisieren. Die einzelnen Terme der Hamiltonfunktion sind im einzelnen die langreichweitige Austauschwechselwirkung zwischen den magneti-

schen Momenten der Eisenatome (erster Summand), die Austauschwechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten der Eisenatome und denen der Platinatome (zweiter Summand), die Austauschwechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten der Platinatome (dritter Summand). Die Summanden vier und fünf sind die Anisotropieterme der Eisen- bzw. Platinatome und die darauffolgenden beiden Terme stellen die Ankopplung der beiden Atomsorten an ein äußeres Feld dar. Der letzte Summand beschreibt die Dipol-Dipol Wechselwirkung aller magnetischen Momente. Die Stärke der dipolaren Kopplung ist dabei durch $\omega = \frac{\mu_0 \mu_s^{(m)} \mu_s^{(n)}}{4\pi a^3}$ gegeben, wobei $\mu_s^{(m)}$ und $\mu_s^{(n)}$ jeweils durch μ_{Fe} bzw. μ_{Pt} zu ersetzen ist, abhängig davon ob der Gitterplatz m bzw. n von einem Eisen oder Platin Atom besetzt ist.

Das Platinatom besitzt nun selbst kein permanentes magnetisches Moment, sondern die magnetischen Momente des Platins werden durch die umgebenden magnetischen Momente der Eisenatome induziert. Somit lassen sich die magnetischen Momente des Platins schreiben als

$$\mathbf{S}_k = \frac{1}{S_{FePt}} \sum_i J_{ik} \mathbf{S}_i \quad (9.2)$$

mit der Summation über alle Fe-Pt Wechselwirkungen $S_{FePt} = \sum_i J_{ik}$. Als Konsequenz ergibt sich $0 \leq |\mathbf{S}_k| \leq 1$.

Die dipolare Wechselwirkung als auch die Austauschwechselwirkung der Platinatome ist vernachlässigbar klein und sollen somit im Weiteren vernachlässigt werden. Kombiniert man jetzt Gl. 9.1 mit Gl. 9.2 so ergibt sich eine effektive Hamiltonfunktion, welche nur noch die magnetischen Momente des Eisens enthält:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{Fe} = & - \sum_{i,j} \frac{\hat{J}_{ij}}{2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - D^{(1)} \sum_i (S_i^z)^2 - \sum_{i,j} \frac{D_{ij}^{(2)}}{2} S_i^z S_j^z - \mu \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i \\ & - \omega_{ij} \sum_{i < j} \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} \end{aligned} \quad (9.3)$$

mit der neuen, effektiven Austauschwechselwirkung

$$\hat{J}_{ij} = J_{ij} + S_{FePt} \sum_k J_{ik} J_{jk} \ , \quad (9.4)$$

der Einionenanisotropie

$$D^{(1)} = D_{Fe} + D_{Pt} S_{FePt}^2 \sum_k J_{ik}^2 \ , \quad (9.5)$$

der Zweiionenanisotropie

$$D_{ij}^{(2)} = 2D_{Pt} S_{FePt}^2 \sum_k J_{ik} J_{jk} \quad (9.6)$$

und dem Moment

$$\mu = \mu_{Fe} + \mu_{Pt} \ . \quad (9.7)$$

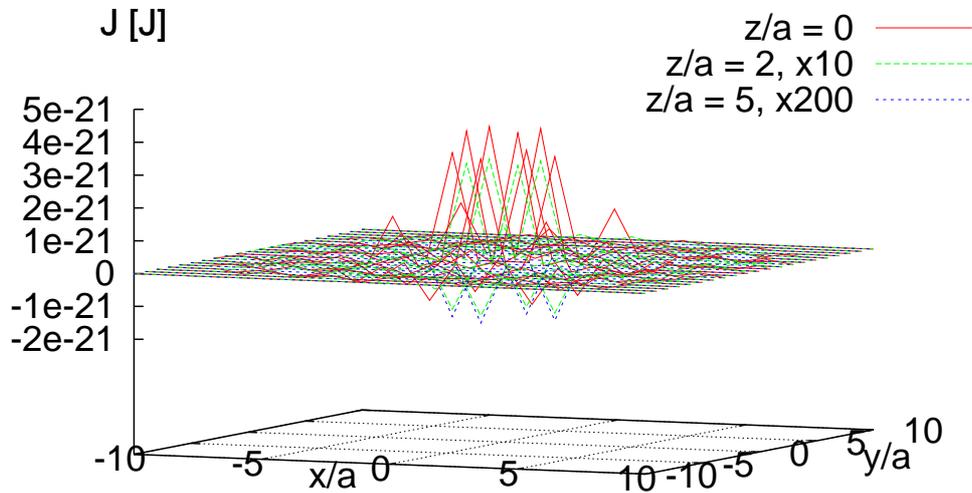


Abbildung 9.2: Ortsdarstellung der langreichweitigen Austauschwechselwirkung. Berücksichtigt werden bis zu zehn nächste Nachbarn in der *Fe*-Ebene (xy -Ebene) und fünf nächste *Fe*-Ebenen. $z/a = 0$: Austauschwechselwirkung innerhalb einer *Fe*-Ebene der L_{10} Struktur, $z/a \neq 0$: Wechselwirkung zweier *Fe*-Momente unterschiedlicher *Fe*-Ebenen. (Die Austauschwechselwirkung ist in diesen Fällen mit dem angegebenen Faktor vergrößert dargestellt.)

Die Austauschwechselwirkung und die Austauschanisotropie (Zweiionenanisotropie) sind langreichweitig, es werden hierbei bis zu zehn nächste Nachbarn berücksichtigt. Diese langreichweitigen Wechselwirkungen werden analog der Dipol-Dipol Wechselwirkung mittels einer Fast-Fourier Transformation behandelt. Die Materialparameter für die langreichweitige Austauschwechselwirkung, sowie die Anisotropien entstammen einer Ab-Initio Rechnung [106–108]. Abb. 9.2 zeigt die berechnete Austauschwechselwirkung entlang der *Fe*-Ebene bzw. in senkrechter Richtung zu den *Fe* Ebenen. Man erkennt deutlich das oszillatorische Verhalten einer RKKY-Wechselwirkung.

Mit Hilfe dieser Hamiltonfunktion lassen sich *FePt* Nanopartikel mittels Langevindynamik untersuchen. Von Interesse ist dabei das thermische Ummagnetisierungs-

verhalten der Nanopartikel. Erste Überlegungen zum Verständnis der thermisch aktivierten Ummagnetisierung lassen sich in der Arbeit von W. F. Brown finden [47]. Die Überlegungen des resultierenden Néel-Brown Modells sollen im Folgenden kurz geschildert werden.

9.2 Das Néel-Brown Modell

Ausgangspunkt ist ein magnetisches Partikel mit einer leichten Achse in z -Richtung. Die Energiedichte läßt sich dann schreiben als:

$$E = KV \sin^2 \theta - \mu H \cos \theta \quad . \quad (9.8)$$

Dabei ist θ der Winkel zwischen der leichten Achse, also der z -Achse und der Richtung der Magnetisierung. H ist ein externes Feld, welches längs der z -Achse orientiert sein möge. K ist die Anisotropiedichte und V das Volumen des Partikels.

Im thermischen Gleichgewicht befindet sich das Teilchen in einem Energieminimum $dE/d\theta = 0$:

$$\sin \theta (2KV \cos \theta + \mu H) = 0 \quad . \quad (9.9)$$

Diese Gleichung hat in dem Intervall von 0 bis π drei Lösungen: zwei Minima $\sin \theta = 0 \Leftrightarrow \theta = 0$ & $\theta = \pi$, sowie ein Maximum $\cos \theta = -\mu H / 2KV$. Die zugehörigen Energiedichten sind:

Minima:

$$E_1 = -\mu H, \quad \theta = 0 \quad (9.10)$$

$$E_2 = +\mu H, \quad \theta = \pi \quad (9.11)$$

Maximum:

$$E_m = KV + \frac{\mu^2 H^2}{4KV} = KV \left[1 + \left(\frac{HM_s}{2K} \right)^2 \right] \quad (9.12)$$

Im letzten Schritt wurde verwendet, daß für das magnetische Moment gilt

$$\mu = VM_s \quad . \quad (9.13)$$

M_s ist dabei die Sättigungsmagnetisierung.

Um von einem Energieminimum E_1 zum anderen E_2 zu gelangen muß die Energiebarriere $\Delta E = E_m - E_1$ überwunden werden. Die Anzahl der Partikel, welche vom Zustand 1 (erstes Energieminimum E_1 , oder Magnetisierung in $+z$ -Richtung) in den Zustand 2 (zweites Energieminimum E_2 , oder Magnetisierung in $-z$ -Richtung) pro Zeiteinheit springen, läßt sich durch folgendes Arrhenius-Gesetz angeben:

$$\begin{aligned} \nu_{12} &= c_{12} e^{-\beta \Delta E} \\ &= c_{12} e^{-\beta KV (1 + H/H_K)^2} \end{aligned} \quad (9.14)$$

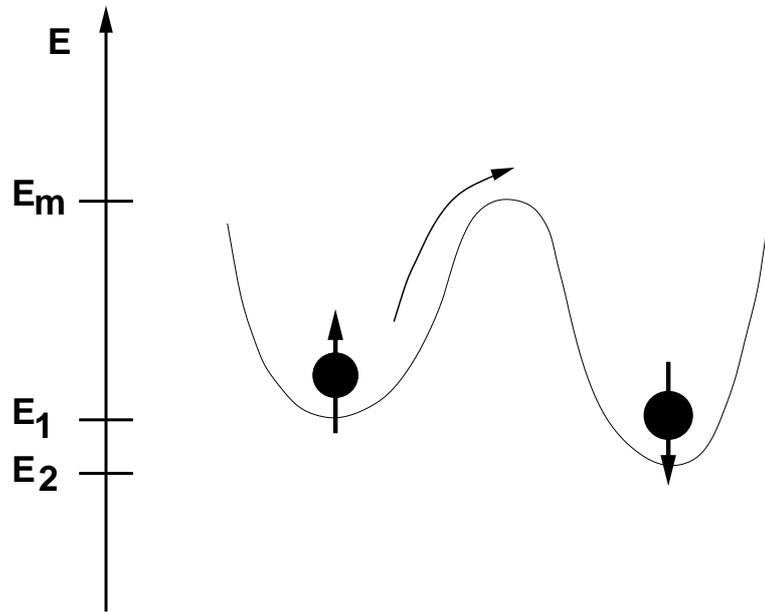


Abbildung 9.3: Energiesketch Néel-Brown-Modell. Um von Zustand 1 (Energieminimum E_1) in den Zustand 2 (Energieminimum E_2) zu gelangen, muß die Energiebarriere $\Delta E = E_m - E_1$ überwunden werden.

Hierbei ist $c_{12} = \text{const.}$, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ und

$$H_K = \frac{2K}{M_s} . \quad (9.15)$$

Analog läßt sich für den Übergang von Zustand 2 in den Zustand 1 angeben:

$$\begin{aligned} \nu_{21} &= c_{21} e^{-\beta(E_m - E_2)} \\ &= c_{21} e^{-\beta KV(1 - H/H_K)^2} \end{aligned} \quad (9.16)$$

Im Falle von $H = 0$ ist

$$\nu_{12} = \nu_{21} = c e^{-\beta KV} \quad (9.17)$$

mit $c_{12} = c_{21} = c$.

In diesem Fall gibt man meist die Relaxationszeit τ an:

$$\tau = \tau_0 e^{-\frac{KV}{k_B T}} . \quad (9.18)$$

Nun findet man aber in der Literatur erste Hinweise, daß dieses einfache Modell unzureichend ist. So ist zum Beispiel die Magnetisierung selber temperaturabhängig, ebenso die Anisotropie [109, 110]. Außerdem scheint es, daß neben den

transversalen Fluktuationen der Magnetisierung auch longitudinale Fluktuationen zu berücksichtigen sind [111]. Es ist deshalb davon auszugehen, daß dieses Modell lediglich für tiefe Temperaturen seine Berechtigung haben dürfte.

Mit Hilfe des obigen Modells ist es dennoch möglich diese Theorie zu überprüfen, wobei die Temperaturabhängigkeiten und die unterschiedlichen Arten der Fluktuationen exakt mitgenommen werden. Doch zuvor soll die Tauglichkeit des Modells an einigen Beispielen, die auch zur Charakterisierung der *FePt* Nanopartikel dienen, demonstriert werden.

9.3 Charakterisierung der *FePt* Nanopartikel



Abbildung 9.4: Momentaufnahmen der Hysterese eines *FePt* Partikels. Dargestellt sind Momentaufnahmen der kohärenten Rotation. Die einzelnen Kegel stellen die *Fe* Momente dar, die *Pt* Momente sind nicht dargestellt. Gut zu erkennen ist die kohärente Ummagnetisierung des Nanopartikels. (Temperatur 1 Kelvin, Partikelgröße 1.54nm)

Die Größe der Nanopartikel ist so gewählt, daß sie eindomänig sind und eine kohärente Rotation als Ummagnetisierungsmechanismus zu erwarten ist. Um dies zu überprüfen, wird an das Nanopartikel ein Gegenfeld angelegt, um es somit umzumagnetisieren. Die Abb. 9.4 zeigt die Ummagnetisierung eines *FePt* Nanopartikels zu äquidistanten Zeitpunkten. Es ist zu erkennen, daß es sich dabei in der Tat mittels einer kohärenten Rotation ummagnetisiert, also alle magnetischen Momente zusammen sich wie ein einziger Makrospin verhalten. Die Abb. 9.5 zeigt die Ummagnetisierungszeit als Funktion der Gilbertdämpfung α . Der $\alpha + 1/\alpha$ -Verlauf weist ebenfalls auf eine kohärente Rotation hin, wobei mit abnehmender Dämpfung die Rotationsbewegung zunimmt, was zu einer Verlängerung der Ummagnetisierungszeit führt. Im Grenzfall großer Dämpfungen kommt es hingegen zu einer direkten Ummagnetisierung, welche mit zunehmender Dämpfung immer stärker gedämpft, und somit immer langsamer wird.

Betrachtet man nun die sich aus der Langevin-Dynamik ergebende Magnetisierung als Funktion der Temperatur (Abb. 9.6), so erkennt man zunächst den linearen Abfall

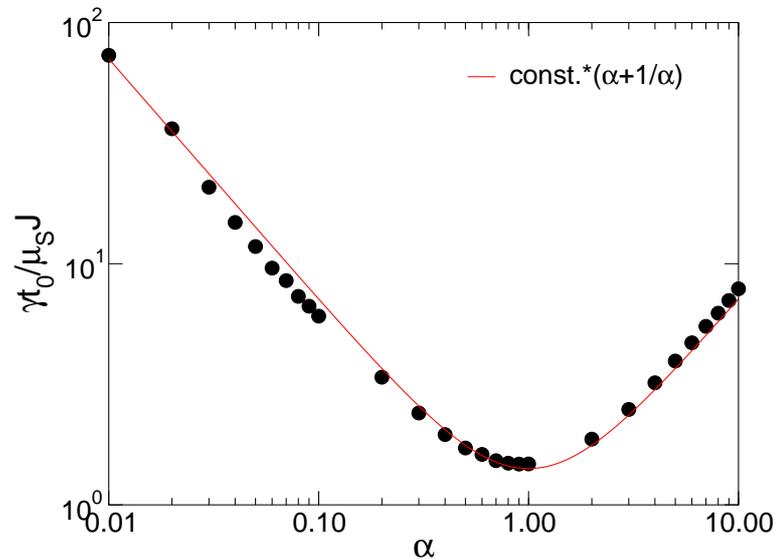


Abbildung 9.5: Ummagnetisierungszeit als Funktion der Gilbertdämpfung α . Die Nanopartikel magnetisieren über eine kohärente Rotation um. Die Kurve gibt das typische Verhalten einer Rotations-Präzessions-Bewegung wieder. Die durchgezogene Linie ist die erwartete α -Abhängigkeit: $\tau \propto \alpha + 1/\alpha$. (Partikelgröße: 1.54nm , Temp.: 1 Kelvin, Magnetfeldstärke: 16 Tesla)

der Magnetisierung bei tiefen Temperaturen, welcher auf den klassischen Charakter der Rechnung zurückzuführen ist. Weiterhin findet man einen *finite size* Effekt, welcher allerdings zu erwarten war, da es sich bei dem Nanopartikel um kein unendlich großes System handelt. Die Magnetisierungskurven zeigen aber auch eine sehr gute Übereinstimmung der Curietemperaturen mit den erwarteten Ergebnissen. So liegen die berechneten Curietemperaturen im Bereich 600 bis 750 Kelvin. Der Wert der Curietemperatur von *FePt* liegt bei ungefähr 750 Kelvin, wobei dieser Wert für ein ausgedehntes Material gilt und durchaus kleiner sein kann, z.B. bei Filmen [113]. Einen *finite size* Effekt findet man ebenfalls bei der temperaturabhängigen Anisotropie, welche definiert ist als die Energiedifferenz der Zustände mit Magnetisierung senkrecht bzw. parallel zur leichten Achse

$$K_1(T) = E(T, B = B\mathbf{e}_\perp) - E(T, B = B\mathbf{e}_\parallel) \quad . \quad (9.19)$$

Abb. 9.7 zeigt die Anisotropie als Funktion der Temperatur. Zu erkennen ist, daß die Zweiionenanisotropie dominierend ist. Weiterhin gut zu erkennen, daß die Anisotropie bei ungefähr 750 Kelvin verschwindet, was auf eine Curietemperatur von ungefähr 750 Kelvin hinweist. Dies bestätigt noch einmal die Qualität des Modells. Mit diesen Tests ist gezeigt worden, daß dieses Modell in der Lage ist, damit *FePt*

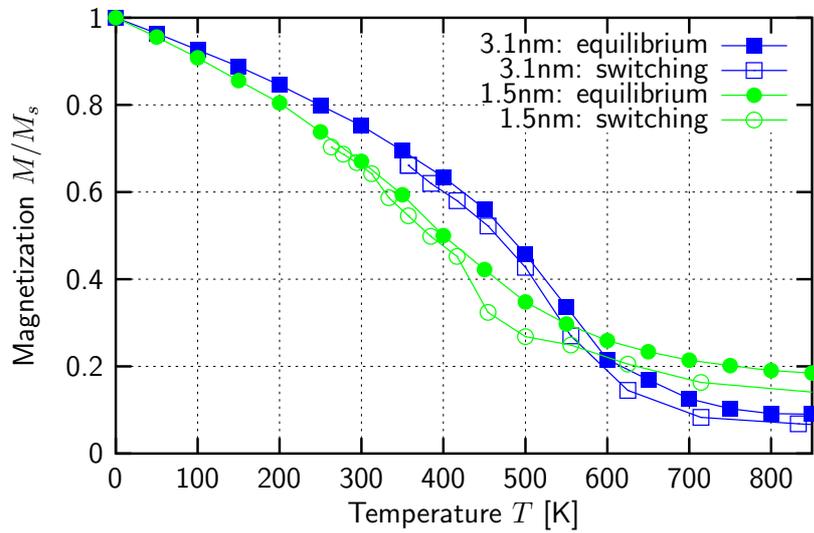


Abbildung 9.6: *FePt*: Magnetisierung als Funktion der Temperatur. (Bild aus [112].)

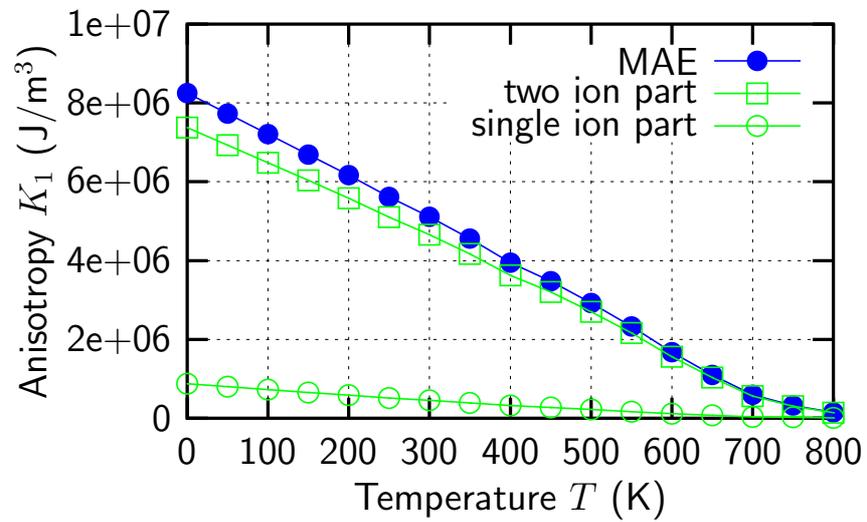


Abbildung 9.7: Temperaturabhängigkeit der Anisotropie. (Bild aus [112].)

Nanopartikel vernünftig zu beschreiben. Jetzt ist man in der Tat in der Lage, der Frage nach der Tauglichkeit der Brown'schen Theorie nachzugehen.

9.4 Überprüfung der Brown'schen Theorie

Abb. 9.8 zeigt die Simulationsergebnisse der thermisch aktivierten Ummagnetisierung, dabei wurde jeder Punkt aus einhundert Simulationsdurchläufen bestimmt. Die durchgezogenen Linien stellen das analytische Ergebnis nach Brown dar

$$\tau = \frac{(1 + \alpha^2) \mu}{\alpha \gamma 2D} \frac{\sqrt{\pi k_B T}}{\sqrt{ND} (1 - h) (1 - h^2)} \exp\left(\frac{ND (1 - h)^2}{k_B T}\right) \quad (9.20)$$

mit $h = \mu_s B / 2D$. Die Anisotropie D berechnet sich dabei als Summe der Einionen-anisotropie $D^{(1)}$ und Zweiionen-anisotropie $D_{ij}^{(1)}$. N ist die Anzahl der Atome des Nanopartikels.

Deutlich zu erkennen ist, daß die analytische Rechnung die numerisch gewonnenen Daten nicht beschreibt. Betrachtet man die numerischen Daten so fällt weiter auf, daß sich die Kurven alle bei einer Temperatur ($\frac{1}{T} = 0.0151/\text{K}$) schneiden. Rechnet man diese inverse Temperatur um, so erkennt man, daß es sich hierbei um die Curietemperatur handelt. Dies weist darauf hin, daß die Energiebarriere temperaturabhängig ist und bei der Curietemperatur verschwindet.

Nimmt man nun die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung und Anisotropie explizit mit und die entsprechenden Größen aus den Simulationen (Abb. 9.6 und 9.7), so findet man im Tieftemperaturbereich eine gute Übereinstimmung der analytischen Theorie mit den numerischen Daten (Abb. 9.9). Die Abweichung bei den hohen Temperaturen ist dabei zu erwarten gewesen, da die Brown'sche Theorie ganz allgemein nur für einen Temperaturbereich von $k_B T \ll \Delta \mathcal{E}$ gültig ist.

Da die Simulationszeit für tiefe Temperaturen relativ groß wird scheint es sinnvoll nach einer anderen Methode zu suchen, um die temperaturabhängige Brown'sche Theorie auch für tiefe Temperaturen weiter zu bestätigen. Ein Weg ist die dynamische Koerzitivfeldstärke zu bestimmen. Dazu wird während der Simulation ein Gegenfeld angelegt, welches mit einer Rate von $\frac{dB}{dt} = 17T/ns$ schrittweise erhöht wird um die Koerzitivfeldstärke zu bestimmen.

Abb. 9.10 zeigt die über 25 Durchläufe gemittelte Koerzitivfeldstärke als Funktion der Temperatur. Die sich aus der Brown'schen Theorie ergebende Koerzitivfeldstärke ist gegeben durch

$$B_c(\tau, T) = \frac{2K_1(T)}{M(T)} \left(1 - \sqrt{\frac{k_B T}{NK_1(T)} \ln\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)}\right) \quad (9.21)$$

Vergleicht man diesen analytischen Ausdruck der Koerzitivfeldstärke unter Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung sowie der Anisotropie, so erkennt man eine gute Übereinstimmung und eine weitere Bestätigung der temperaturabhängigen Brown'schen Theorie.

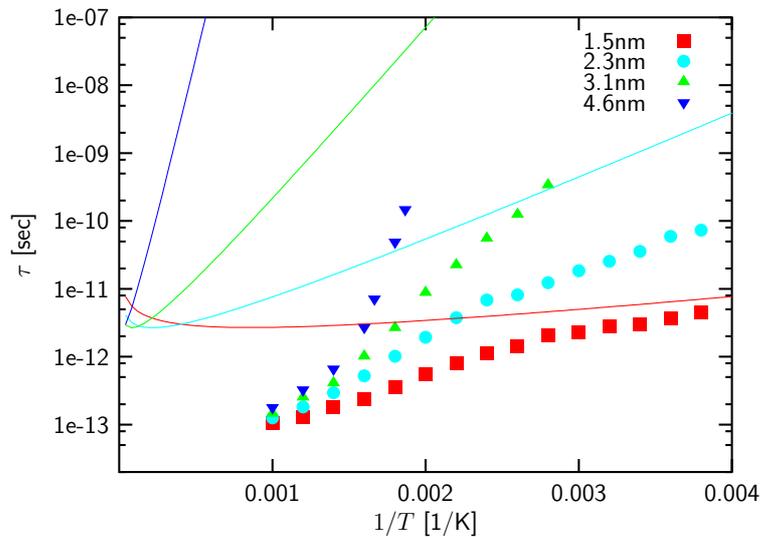


Abbildung 9.8: Überprüfung des Néel-Brown Gesetzes. Mit dem Néel-Brown Gesetz lassen sich die numerisch bestimmten Kurven nicht fiten. Das Néel-Brown Gesetz versagt da die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung, sowie der Anisotropie nicht eingeht. (Bild aus [112].)

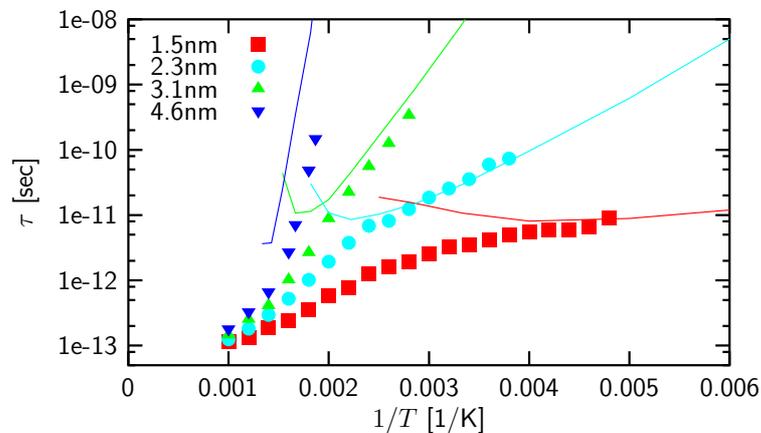


Abbildung 9.9: Überprüfung des thermischen Néel-Brown Gesetzes. Hier wurde die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung, sowie der Anisotropie berücksichtigt, so daß für tiefe Temperaturen eine Übereinstimmung der numerischen Daten mit dem thermischen Néel-Brown Gesetzes gefunden wird. Für hohe Temperaturen war keine Übereinstimmung zu erwarten, da die Néel-Brown Theorie nur für tiefe Temperaturen gilt. (Bild aus [112].)

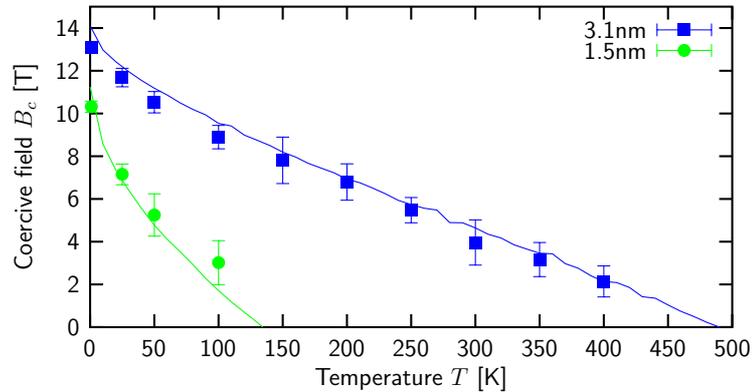


Abbildung 9.10: Temperaturabhängigkeit der Koerzitivfeldstärke. Die numerischen Daten werden sehr gut durch Gl. 9.21 beschreiben. (Bild aus [112].)

9.5 Anwendung der lokalen Molekularfeldnäherung auf FePt Nanopartikel

Die Hamiltonfunktion Gl. 9.3 wurde entwickelt, um damit Langevin-Dynamik zu betreiben. Allerdings lassen sich mit ihrer Hilfe noch andere Rechnungen durchführen. So läßt sich eine Molekularfeldnäherung durchzuführen. Die korrespondierende Hamiltonfunktion ist gegeben durch

$$\mathcal{H}_{MF}^- = - \sum_{i,j} \frac{\hat{J}_{ij}}{2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{m}_j - D^{(1)} \sum_i (S_i^z)^2 - \sum_{i,j} \frac{D_{ij}^{(2)}}{2} S_i^z m_j^z - \mu \mathbf{B} \cdot \sum_i \mathbf{S}_i, \quad (9.22)$$

wobei alle Terme, die nicht \mathbf{S}_i , enthalten vernachlässigt wurden. Die langreichweitige Austauschwechselwirkung sowie die langreichweitige Zweiionenanisotropie werden dabei mittels einer Fast Fourier Transformation berechnet.

Die Magnetisierung ergibt sich dann, analog zu anderen Molekularfeldnäherungen, zu

$$\mathbf{m}_i = \frac{\text{Sp } \mathbf{S}_i e^{-\beta \mathcal{H}_{MF}^-}}{\text{Sp } e^{-\beta \mathcal{H}_{MF}^-}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (9.23)$$

Die Abb. 9.11(a) zeigt die Magnetisierung als Funktion der Temperatur für die bereits untersuchten *FePt* Nanopartikel. Die Ergebnisse werden dabei mit der Langevin-Dynamik-Simulation verglichen. Wie zu erwarten war ergibt sich für die Molekularfeldnäherung eine zu große Curietemperatur T_c . Ganz allgemein ist die Magnetisierung zu groß, was auf die Vernachlässigung der Fluktuationen zurückzuführen ist und zu erwarten war.

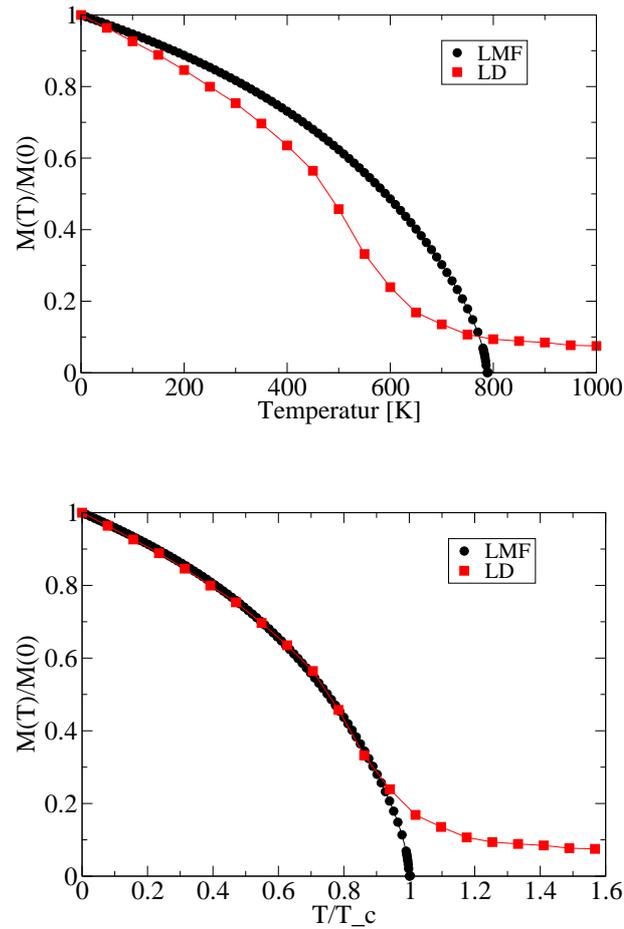


Abbildung 9.11: *FePt*-MF: Magnetisierung über der Temperatur. (a) Vergleich der Molekularfeldnäherung mit der Langevin-Dynamik-Simulation eines 3.5 nm Partikels. (b) Der gleiche Plot dargestellt mit einer renormierten Temperatur.

Verwendet man nun allerdings für die Auftragung statt der Temperatur eine renormierte Temperatur Abb. 9.11(b), so erkennt man, daß die Magnetisierungskurven übereinander liegen. Dies zeigt, daß aufgrund der langreichweitigen Wechselwirkung ein molekularfeldartiges Verhalten vorliegt. Die unterschiedliche Curietemperatur ist dabei, wie bereits erwähnt, auf die Vernachlässigung der Fluktuationen zurückzuführen. Ebenso ist das Nichtauftreten des *finite size* Effektes eine Folge davon. Dies hat wiederum den Vorteil, daß die Curietemperatur einfach abgelesen werden kann. Dazu ist es allerdings notwendig den “Renormierungsfaktor” zu bestimmen, also den Faktor, um den die Magnetisierung der Molekularfeldnäherung zu groß ist gegenüber der eigentlichen Magnetisierung.

Letztendlich bleibt aber festzuhalten, daß es sich bei der Molekularfeldnäherung um eine Näherung handelt, welche lediglich zur Unterstützung der Langevin-Dynamik-Simulationen verwendet werden sollte.

9.6 Anwendung der RPA Greenfunktionsrechnung auf FePt Bulksysteme

Die in Abschnitt 5.4 beschriebene Methode ist allgemeingültig und soll nun auf den Fall eines Eisen-Platin Systems übertragen werden. Dabei soll zunächst nur ein unendlich ausgedehntes System betrachtet werden, da die Bewegungsgleichungen mittels der Fouriertransformationen gelöst werden, was wiederum ein unendlich ausgedehntes System voraussetzt. Eine Reduktion vergrößert dahingehend den Rechenaufwand, da mehr Bewegungsgleichungen gelöst werden müssen. Dies ist prinzipiell möglich und im Rahmen von Schichtsystemen realisiert [114–116]. In diesem Fall ist für jede Schicht eine Bewegungsgleichung zu lösen. Im Fall der Nanopartikel muß für jedes magnetische Moment eine Bewegungsgleichung gelöst werden, was einen unheimlichen Rechenaufwand zur Folge hätte.

Das FePt Gitter besteht, nachdem man die Platinatome in die Wechselwirkungen integriert hat (Siehe Anfang von Kapitel 9), aus einem kubischen Gitter, wobei nicht alle Gitterplätze besetzt sind. Um genau zu sein handelt es sich um ein verzerrtes kubisches Gitter, da der Gitterabstand in den Eisenebenen (xy -Ebene) geringer ist als zwischen den Eisenebenen und den Platinebenen. Diese Verzerrung ist allerdings gering und wird deshalb vernachlässigt. Abb. 9.12 zeigt schematisch das betrachtete Gitter.

Das Vorgehen ist nun analog dem im Abschnitt 5.4 beschriebenen Verfahren. Die Energie ist durch Gl. 5.24 gegeben, wobei $J(0)$ und $D(0)$ sich aus der Aufsummation der J_{ij} bzw. $D_{ij}^{(2)}$ ergeben, welche bereits für die Langevin-Dynamik bzw. Molekularfeldnäherung verwendet wurden. Die $J(\mathbf{k})$ ergeben sich aus der expliziten Berechnung von Gl. 5.26. Die J_{lm} sind dabei wieder den Ab-Initio-Daten entnommen.

Nun läßt sich eine der beiden Summation in Gl. 5.26 ausführen, wobei man drei

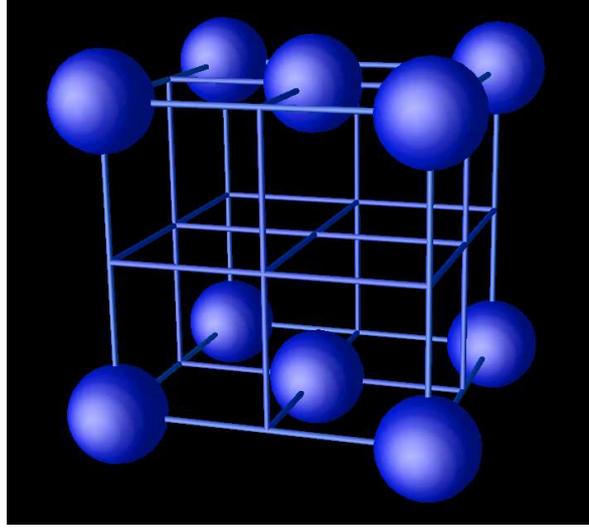


Abbildung 9.12: Das in den Simulationen verwendete kubisches Gitter. Die Gitterkonstante ist a , damit ergibt sich als Abstand zweier Spins entlang einer Achsenrichtung $2a$ und als kürzeste Entfernung zwischen zwei Spins $\sqrt{2}a$.

Fälle unterscheiden kann. Zum einen treten Summanden auf bei denen zwei der drei Komponenten des Ortsvektors Null sind. In diesem Fall ergibt sich z.B.

$$2 \cos(k_x n_x a) = e^{i k_x n_x a} + e^{-i k_x n_x a} ,$$

y und z analog. n_x ist dabei eine ganze Zahl, die den Abstand in Einheiten der Gitterkonstante a widerspiegelt.

Dann treten Summanden auf, wo eine der Komponenten des Ortsvektors Null ist. Hier ergibt sich

$$4 \cos(k_x n_x a) \cos(k_y n_y a) = e^{i(k_x n_x a + k_y n_y a)} + e^{i(k_x n_x a - k_y n_y a)} + e^{-i(k_x n_x a - k_y n_y a)} + e^{-i(k_x n_x a + k_y n_y a)} ,$$

xz und yz analog. n_x und n_y sind dabei ganze Zahlen und bestimmen den Abstand in x bzw. y Richtung.

Es verbleiben noch die Exponentialfunktionen, deren Ortsvektor alle Komponenten ungleich Null hat. Hier lassen sich immer acht zusammenfassen und man erhält $8 \cos(k_x n_x a) \cos(k_y n_y a) \cos(k_z n_z a)$. n_x , n_y und n_z sind ganze Zahlen. Abb. 9.13 zeigt dies noch einmal schematisch. Die Gittersumme läßt sich somit angeben als

$$J(\mathbf{k}) = \sum_i J(n_x, n_y, n_z) 2^{\epsilon_x} 2^{\epsilon_y} 2^{\epsilon_z} \cos(k_x n_x a) \cos(k_y n_y a) \cos(k_z n_z a) . \quad (9.24)$$

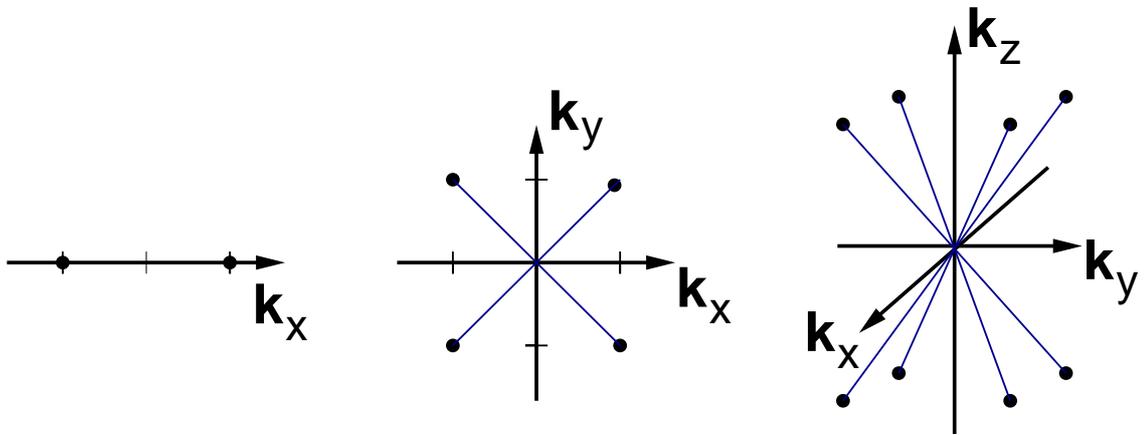


Abbildung 9.13: RPA-Sketch: dargestellt sind bei der Fouriertransformation auftretenden Gittersummen, welche durch die Wechselwirkung zweier magnetischer Momente entlang einer Achsenrichtung, durch vier magnetische Momente in einer Raumebene bzw. durch die restlichen magnetischen Momente auftreten. Die sich ergebende Gittersumme ist durch Gl. 9.24 gegeben.

Die ϵ_η , $\eta \in x, y, z$ sind dabei wie folgt definiert: Sie sind Eins, wenn $n_\eta \neq 0$ und Null, wenn $n_\eta = 0$. Die Summation selbst geht dabei über alle Gitterplätze. Damit und mit den Selbstkonsistenzgleichungen Gl. 5.28 und Gl. 5.30 läßt sich nun die Magnetisierung für das *FePt*-System berechnen. Abb. 9.15 zeigt die Curietemperatur als Funktion der Spinquantenzahl S , aufgetragen ist zudem die experimentelle Curietemperatur von 750 K. Zu erkennen ist, daß die Curietemperatur mit zunehmender Spinquantenzahl S abnimmt und für $S \rightarrow \infty$ unterhalb von 750 K liegt. An dieser Stelle muß man anmerken, daß nicht klar ist, welche Spinquantenzahl im Fall des *FePt* vorliegt, da Spinquantenzahlen eigentlich nur für lokalisierte magnetische Momente existieren. Ein Blick in die Literatur offenbart, daß im Fall von RPA-Rechnungen von Materialsystemen in den meisten Fällen eine nächste Nachbараustauschwechselwirkung verwendet wurde, wobei die Stärke der Austauschwechselwirkung derart angepaßt wurde, daß sich die richtige Curietemperatur ergibt.

Betrachtet man nun die Abb. 9.15 etwas genauer und im Vergleich mit Fig. 5 in [51] so wird klar, daß im Fall großer Spinquantenzahlen die RPA-Näherung die Curietemperatur als zu klein angibt. Dies ist ebenfalls aus der Literatur bekannt [50], wo die RPA-Näherung als gut für kleine Spinquantenzahlen insbesondere $S = 1/2$ eingeschätzt wird. Dies bedeutet aber, daß in diesem Fall die Spinquantenzahl sehr groß evt. unendlich ist. Das spricht jedenfalls für eine klassische Beschreibung, wie sie im ersten Teil dieses Kapitels durchgeführt wurde.

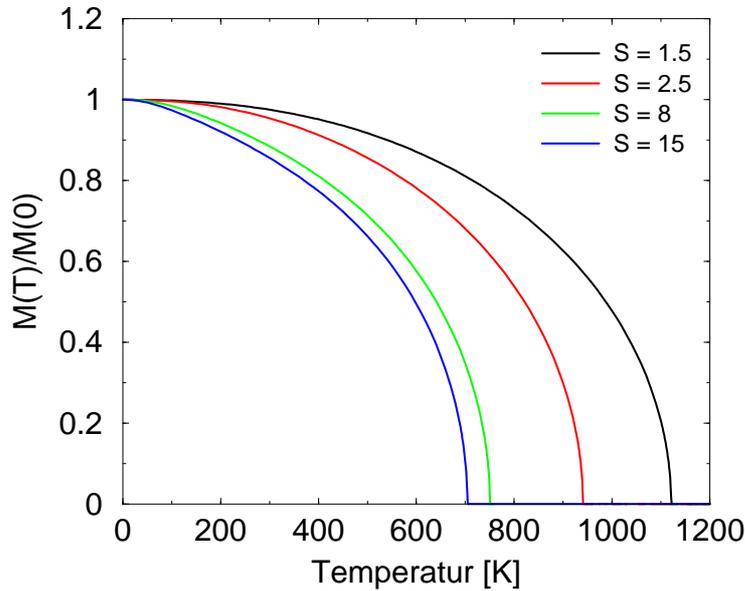


Abbildung 9.14: Reduzierte Magnetisierung $M(T)/M(0)$ als Funktion der Temperatur für *FePt*. Die Kurven sind mit der Methode der Greenfunktionen mit RPA-Entkopplung gerechnet.

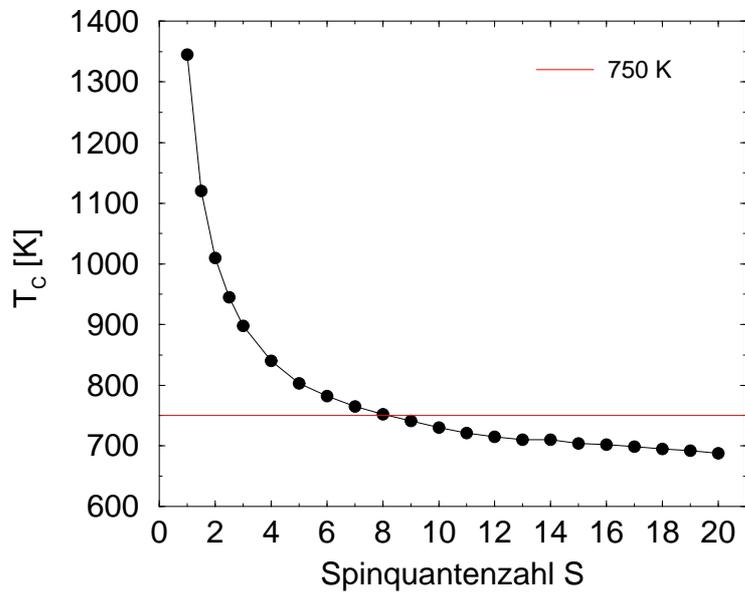


Abbildung 9.15: Curietemperatur T_c von *FePt* als Funktion der Spinquantenzahl S . Die Curietemperatur von *FePt* beträgt 750 Kelvin. Die rote Linie schneidet die Kurve bei einer Spinquantenzahl von $S = 8$, atomares *Fe* hat eine Spinquantenzahl $S = 3/2$. Der Unterschied besteht darin, daß hier kein atomares System vorliegt und Spinquantenzahlen nur in einem solchen definiert sind.

10 Zusammenfassung

Gegenstand dieser Arbeit ist die Untersuchung der Dynamik und Thermodynamik von Domänen und Domänenwandstrukturen. Den hierfür verwendeten numerischen Verfahren liegt das Heisenberg Modell mit langreichweitiger Dipol-Dipol Wechselwirkung und lokalen Anisotropien zugrunde.

Um ein möglichst genauen Überblick über die auftretenden Phänomene zu gewinnen, ist eine Reihe unterschiedlicher numerischer Verfahren verwendet worden. Die dabei gewonnenen Ergebnisse sind gegenübergestellt und verglichen worden. Es hat sich dabei gezeigt, daß sich die einzelnen Verfahren ergänzen und erst die Kombination der unterschiedlichen Rechnungen einen umfassenden Überblick liefert.

Die Untersuchung der Dynamik von Domänenwänden in Nanodrähten zeigt, daß die beiden auftretenden Wandformen (transversale Domänenwand und Vortex-domänenwand) unterschiedliche Ummagnetisierungsmechanismen aufweisen, was zu unterschiedlichen Domänenwandgeschwindigkeiten führt. Eine genaue Betrachtung zeigt auf, daß die drei in der Literatur verzeichneten Geschwindigkeitsgleichungen (Walker Gleichung, die Gleichung von Landau und Lifshitz sowie die Slonczewski-Gleichung) auf diesen unterschiedlichen Ummagnetisierungsmechanismen basieren und somit alle drei Gültigkeit besitzen.

Als äußerst interessant erscheint zudem der Grenzfall der verschwindenden Dämpfung (Reibung). In diesem Grenzfall reduziert sich die klassische Bewegungsgleichung des Heisenberg Modells, die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung, auf eine Gleichung, welche nur noch die Präzessionsbewegung, aber nicht mehr die Relaxation der magnetischen Momente beschreibt. Aus dieser Überlegung heraus erscheint eine Domänenwandbewegung in diesem Grenzfall als nicht möglich. Es zeigt sich allerdings, daß es in diesem Grenzfall unter bestimmten Umständen doch zu einer Domänenwandbewegung kommt. In diesen Fällen kommt es aufgrund der Impuls- und Energieerhaltung zur Emission von Spinwellen.

Betrachtet man die Thermodynamik der Domänenwände, so findet man ein unterschiedliches Verhalten der Magnetisierung in den Domänen und in der Domänenwand. Trägt man die Magnetisierung als Funktion der Temperatur für beide Fälle auf so läßt sich erkennen, daß die Magnetisierung in der Domänenwand schneller verschwindet als in den Domänen und daß zwei kritische Temperaturen auftreten. Die Ursache hierfür ist eine unterschiedlich starke Kopplung der magnetischen Momente in den Domänen bzw. in der Domänenwand. In der Domänenwand kommt es aufgrund der Verkippung der magnetischen Momente zu einer verringerten

ten Kopplung, und somit zu einer Reduzierung der kritischen Temperatur. Weiterhin sind nur die magnetischen Momente in den Domänen in Richtung der leichten Anisotropieachse orientiert, während die magnetischen Momente in der Domänenwand eine senkrechte Orientierung aufweisen. Dies verstärkt den Effekt zudem, da die Anisotropie ebenfalls einen Einfluß auf die kritische Temperatur besitzt. Vergleicht man nun die Ergebnisse aus den für diese Untersuchung verwendeten numerischen Verfahren (Molekularfeldnäherung und Monte Carlo Simulation) so stellt man eine qualitative Übereinstimmung fest, wobei quantitativ die Molekularfeldnäherung die auftretenden Effekte unterschätzt.

Diese Überlegungen zur Thermodynamik der Domänenwände lassen sich nun ganz allgemein auf alle magnetischen Strukturen, welche nicht eindomänig sind, übertragen, so z.B. auf *Vortexstrukturen*. Analog zu den Domänenwänden läßt sich hier ein unterschiedliches Verhalten der Magnetisierung bzw. zwei verschiedene kritische Temperaturen beobachten. In diesem Fall nimmt die Magnetisierung des *Vortexcores* schneller ab als die Magnetisierung des Wirbels. Die Argumentation ist analog zu dem Fall der Domänenwände. Auch hier liegt eine verringerte Kopplung der magnetischen Momente aufgrund einer Verkipfung vor.

Untersucht wurde dieses Phänomen mittels einer lokaler Molekularfeldrechnung, bei der es sich bekanntlich um ein Verfahren zur Berechnung der Gleichgewichtsthermodynamik handelt, dynamische Effekte werden dabei nicht betrachtet. Um zu überprüfen ob relevante dynamische Effekte auftreten, wurde das System zusätzlich mittels Langevin-Dynamik untersucht. Es stellt sich heraus, daß neben dem thermodynamischen Effekt der verschwindenden *Coremagnetisierung* ebenfalls ein superparamagnetisches Verhalten des *Vortexcores* zu beobachten ist. An dieser Stelle offenbart sich somit die Notwendigkeit der Verwendung unterschiedlicher sich ergänzender Untersuchungsmethoden.

Die Überprüfung der Anwendbarkeit des Néel-Brown-Gesetzes im Fall des superparamagnetischen Verhaltens von *FePt*-Nanopartikeln zeigt, daß das Néel-Brown-Gesetz unzureichend ist, da es die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung bzw. der Anisotropien und longitudinale Fluktuationen der Magnetisierung nicht berücksichtigt. Unter Beachtung dieser Umstände läßt sich ein temperaturabhängiges Néel-Brown-Gesetz angeben, welches die Simulationsergebnisse besser widerspiegelt. Für diese Simulation wurden erstmals langreichweitige Wechselwirkungen und Materialparameter aus *Ab-Initio*-Rechnungen verwendet. Der Vergleich mit dem Experiment zeigt dabei eine sehr gute Übereinstimmung.

Generell hat sich gezeigt, daß die Untersuchung der Thermodynamik von Nanostrukturen noch am Anfang ist. Besonders die Untersuchung der Dynamik bei endlichen Temperaturen gestaltet sich relativ schwierig und bedarf evt. neuer bzw. weiterentwickelter Verfahren.

A Anhang

A.1 Fast Fourier Transformation

Zur Berechnung des Dipolfeldes und damit der Dipolwechselwirkungsenergie wird eine Fast Fourier Transformation verwendet [63, 117]. Um diese anwenden zu können wird jedem magnetischen Moment, am Gitterplatz (k, l, m) eine Zahl i zugeordnet, d. h. der 3 dimensionale Ortsraum wird auf einen 1 dimensionalen Raum abgebildet. Dann läßt sich die Dipolwechselwirkungsenergie schreiben als

$$\mathcal{H}_{dip} = -\frac{\omega}{2} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j) - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} = -\frac{\omega}{2} \sum_i^N \mathbf{H}_i \cdot \mathbf{S}_i \quad (\text{A.1})$$

i, j sind zwei magnetische Momente, welche sich an den Gitterplätzen $\mathbf{r}_i = (k_i, l_i, m_i)$ und $\mathbf{r}_j = (k_j, l_j, m_j)$ befinden. $\mathbf{e}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}$, mit $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ und $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, ist der Einheitsvektor der vom magnetischen Moment i in Richtung des magnetischen Momentes j zeigt. Das Dipolfeld ist dann gegeben durch

$$\mathbf{H}_i = \sum_{j \neq i} \frac{3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})\mathbf{e}_{ij} - \mathbf{S}_j}{r_{ij}^3} \quad (\text{A.2})$$

Unter Verwendung griechischer Indizes für die kartesischen Komponenten des Vektors $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$, läßt sich das Dipolfeld schreiben als

$$H_i^\alpha = \sum_\beta \sum_{j=1}^N \omega_{ij}^{\alpha\beta} S_j^\beta \quad (\text{A.3})$$

$\underline{\omega}_{ij}$ ist dabei ein symmetrischer Tensor

$$\underline{\omega}_{ij} = \frac{1}{r_{ij}^3} \begin{pmatrix} 1 - 3(e_{ij}^x)^2 & -3e_{ij}^y e_{ij}^x & -3e_{ij}^z e_{ij}^x \\ -3e_{ij}^x e_{ij}^y & 1 - 3(e_{ij}^y)^2 & -3e_{ij}^z e_{ij}^y \\ -3e_{ij}^x e_{ij}^z & -3e_{ij}^y e_{ij}^z & 1 - 3(e_{ij}^z)^2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

Der Dipoltensor hängt nur von dem Abstand $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ ab. Da $\underline{\omega}_{ij}$ für $i = j$ divergiert, ist es Konvention $\underline{\omega}_{ii} = 0$ zu setzen. Es gibt nun N verschiedenen Matrizen

$\underline{\omega}_{|i-j|}$.
Die Fouriertransformierte des Dipolfeldes

$$H_i^\alpha = \sum_{\beta} \sum_{j=1}^N \omega_{|i-j|}^{\alpha\beta} S_j^\beta \quad (\text{A.5})$$

läßt sich nun mittels des Faltungstheorems¹ [118] berechnen

$$H_k^\alpha = \sum_{\beta} \omega_k^{\alpha\beta} S_k^\beta . \quad (\text{A.6})$$

Zur Berechnung des Dipolfeldes H_i^α werden zuerst die N Matrizen $\underline{\omega}_{|i-j|}$ aufgestellt. Anschließend werden die Fouriertransformierten $\omega_k^{\alpha\beta}$ und S_k^β bestimmt und H_k^α berechnet. Zum Schluß wird H_k^α zurücktransformiert, um das reale Dipolfeld \mathbf{H}_i zu erhalten.

Um das Faltungstheorem anwenden zu können muß das System räumlich periodisch und von der gleichen Größe wie die Reichweite der Wechselwirkungen, i.a. unendlich, sein. Dies wird erreicht durch ein Verfahren, welches *Zero Padding* genannt wird [118]. Das System wird in jede Raumrichtung verdoppelt und mit magnetischen Momenten der Länge Null aufgefüllt. Dadurch ist das System räumlich periodisch und die Wechselwirkungen sind nun von endlicher Reichweite.

Der Vorteil der Fast Fourier Transformation ist nun, daß anstatt N^2 nur $N \log N$ Rechenschritte zur Berechnung des Dipolfeldes benötigt werden².

A.2 Berechnung der Rotation auf einem 2 dim. Gitter

Zur Berechnung der Zirkulation muß die z - Komponente der Rotation in der Schnittebene (x, y, z) des Drahtes berechnet werden, also auf einem 2 dimensionalen Gitter. Dazu sind folgende Ableitungen zu berechnen $\frac{\partial S_x}{\partial y}$ und $\frac{\partial S_y}{\partial x}$. Ableitungen lassen sich numerisch durch den Differentialquotienten

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (\text{A.7})$$

berechnen. In dem in der Arbeit vorliegenden Fall sind folgende Differentialquotienten zu betrachten

$$\frac{\partial S_x(k, l)}{\partial y} = \frac{S_x(k, l + 1) - S_x(k, l - 1)}{2a} \quad (\text{A.8})$$

bzw.

$$\frac{\partial S_y(k, l)}{\partial x} = \frac{S_x(k + 1, l) - S_x(k - 1, l)}{2a} . \quad (\text{A.9})$$

¹Das Faltungstheorem besagt, daß die Fouriertransformierte einer Faltung zweier Funktionen gleich dem Produkt der Fouriertransformierten der einzelnen Funktionen ist.

² N ist die Systemgröße: $i \leq N$

a ist der Gitterabstand und k, l stellen die x bzw. die y Koordinate des betrachteten magnetischen Momentes dar. Um die Ableitung $\frac{\partial S_x}{\partial y}$ am Ort (k, l) zu berechnen sind die x Komponente von \mathbf{S} an den Orten $(k, l + 1)$ und $(k, l - 1)$, d. h. den nächsten Nachbarn in y Richtung, notwendig. Analog für die Ableitung $\frac{\partial S_y}{\partial x}$, die y Komponente von \mathbf{S} der nächsten Nachbarn in x Richtung. Hierbei ist zu beachten, daß sich die nächsten Nachbarn innerhalb des betrachteten Gitterbereiches liegen, da außerhalb des betrachteten Gitters ist $\mathbf{S} = 0$. Dies bedeutet, daß die Rotation für die magnetischen Momente am Rand nicht berechnet wird.

Mit diesen Differentialquotienten läßt sich z.B. die z -Komponente der Rotation berechnen

$$(\text{rot}\mathbf{S})_z = \frac{\partial S_y(k, l)}{\partial x} - \frac{\partial S_x(k, l)}{\partial y} . \quad (\text{A.10})$$

A.3 Die Gauß Quadratur

Die Gauß-Legendre Integration oder allgemein die Gauß-Quadratur ist ein Verfahren zur numerischen Berechnung von Integralen der Form

$$I = \int_a^b f(x)w(x)dx .$$

Der Integrand setzt sich dabei zusammen aus einer stetigen Funktion $f(x)$ und einer Wichtungsfunktion $w(x)$. Der Integrationsbereich $[a, b]$ ist dabei nicht auf endliche Intervalle beschränkt.

Mit

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)w(x) dx &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x\right) w\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x\right) dx \\ &\approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^N w_i f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_i\right) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

läßt sich das Integral in eine numerisch brauchbare Form bringen. Im ersten Schritt wurden die Grenzen a und b auf -1 bzw. 1 reskaliert da die Stützstellen x_i sowie die Wichtungen w_i aus den Legendre-Polynomen berechnet werden (Gauß - Legendre). Da die Wichtungen "symmetrisch" bzgl. des Nullpunktes $x = 0$ sind $w[x] = w[-x]$, läßt sich obige Summation auch schreiben als

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^{N/2} w_i \left(f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_i\right) + f\left(\frac{b+a}{2} - \frac{b-a}{2}x_i\right) \right) \quad (\text{A.12})$$

wobei man nun nur noch über die halbe Anzahl Stützstellen summieren muß. Hierbei ist anzumerken, daß x_i nicht mehr im Bereich $-1 \leq x_i \leq 1$ ist sondern im Bereich $0 \leq x_i \leq 1$ zu wählen ist.

Ein Programm zur Bestimmung der Stützstellen x_i und der zugehörigen Wichtungsfunktionen w_i findet sich in dem Buch "*Numerical recipes*" [118].

A.3.1 3D Gauß Quadratur mit "festen" Integrationsgrenzen

Dreidimensionale Integrale lassen sich nun berechnen durch

$$I = \int_a^b \int_c^d \int_e^f f(x, y, z) dx dy dz = \int_a^b \int_c^d g(x, y) dx dy = \int_a^b h(x) dx \quad (\text{A.13})$$

mit

$$g(x, y) = \int_e^f f(x, y, z) dz \quad (\text{A.14})$$

und

$$h(x) = \int_c^d g(x, y) dy \quad (\text{A.15})$$

Man startet mit der Berechnung von $g(x, y)$, und setzt das Ergebnis als Integrand in das Integral zur Berechnung von $h(x)$ ein. Mit $h(x)$ läßt sich dann die Integration über x durchführen, das Ergebnis ist I .

Dies bedeutet im Fall der Gauß-Legendre Integration daß $g(x, y)$ gegeben ist durch

$$g(x, y) = \int_e^f f(x, y, z) dz = \frac{f-e}{2} \sum_k w_k f(x, y, \frac{f+e}{2} + \frac{f-e}{2} z_k) \quad (\text{A.16})$$

Dann ist

$$\begin{aligned} h(x) &= \int_c^d g(x, y) dy = \frac{d-c}{2} \sum_j w_j g(x, \frac{d+c}{2} + \frac{d-c}{2} y_j) \\ &= \frac{d-c}{2} \sum_j w_j \frac{f-e}{2} \sum_k w_k f(x, \frac{d+c}{2} + \frac{d-c}{2} y_j, \frac{f+e}{2} + \frac{f-e}{2} z_k), \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

und somit

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b h(x) dx = \frac{b-a}{2} \sum_i w_i h(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} x_i) \\ &= \frac{(b-a)(d-c)(f-e)}{8} \sum_i \sum_j \sum_k w_i w_j w_k \cdot \\ &\quad \cdot f(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} x_i, \frac{d+c}{2} + \frac{d-c}{2} y_j, \frac{f+e}{2} + \frac{f-e}{2} z_k) \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Der analoge Ausdruck für Gl. A.12 in 3D ist dann:

$$\begin{aligned} I &= \frac{(b-a)(d-c)(f-e)}{8} \sum_i \sum_j \sum_k w_i w_j w_k \cdot \\ &\quad \cdot \left[f(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} x_i, \frac{d+c}{2} + \frac{d-c}{2} y_j, \frac{f+e}{2} + \frac{f-e}{2} z_k) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned}
 &+ f\left(\frac{b+a}{2} - \frac{b-a}{2}x_i, \frac{d+c}{2} + \frac{d-c}{2}y_j, \frac{f+e}{2} + \frac{f-e}{2}z_k\right) \\
 &+ f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_i, \frac{d+c}{2} - \frac{d-c}{2}y_j, \frac{f+e}{2} + \frac{f-e}{2}z_k\right) \\
 &+ f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_i, \frac{d+c}{2} + \frac{d-c}{2}y_j, \frac{f+e}{2} - \frac{f-e}{2}z_k\right) \\
 &+ f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_i, \frac{d+c}{2} - \frac{d-c}{2}y_j, \frac{f+e}{2} - \frac{f-e}{2}z_k\right) \\
 &+ f\left(\frac{b+a}{2} - \frac{b-a}{2}x_i, \frac{d+c}{2} + \frac{d-c}{2}y_j, \frac{f+e}{2} - \frac{f-e}{2}z_k\right) \\
 &+ f\left(\frac{b+a}{2} - \frac{b-a}{2}x_i, \frac{d+c}{2} - \frac{d-c}{2}y_j, \frac{f+e}{2} + \frac{f-e}{2}z_k\right) \\
 &+ f\left(\frac{b+a}{2} - \frac{b-a}{2}x_i, \frac{d+c}{2} - \frac{d-c}{2}y_j, \frac{f+e}{2} - \frac{f-e}{2}z_k\right)
 \end{aligned}$$

A.3.2 3D Gauß Quadratur ohne "feste" Integrationsgrenzen

Im allgemeinen integriert man nicht über einen Kubus, d.h. man hat während der Integration keine festen Integrationsgrenzen, sondern die Integrationsgrenzen sind Funktionen von x bzw. y .

$$I = \int_{x=a}^b \left(\int_{y=y_1(x)}^{y_2(x)} \left(\int_{z=z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} f(x, y, z) dz \right) dy \right) dx \quad (\text{A.20})$$

Analog zu den Überlegungen in Abschnitt A.3.1 läßt sich die 3D Gauß Quadratur dann schreiben als:

$$I = \sum_i \sum_j \sum_k \frac{b-a}{2} \frac{y_2(\tilde{x}) - y_1(\tilde{x})}{2} \frac{z_2(\tilde{x}, \tilde{y}) - z_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{2} w_i w_j w_k f(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) \quad (\text{A.21})$$

wobei

$$\tilde{x} = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}x_i \quad (\text{A.22})$$

$$\tilde{y} = \frac{y_2(\tilde{x}) + y_1(\tilde{x})}{2} + \frac{y_2(\tilde{x}) - y_1(\tilde{x})}{2}y_j \quad (\text{A.23})$$

und

$$\tilde{z} = \frac{z_2(\tilde{x}, \tilde{y}) + z_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{2} + \frac{z_2(\tilde{x}, \tilde{y}) - z_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{2}z_k \quad (\text{A.24})$$

ist.

Literaturverzeichnis

- [1] D. A. Allwood, G. Xiong, M. D. Cooke, C. C. Faulkner, D. Atkinson, N. Vernier und R. P. Cowburn, *Submicrometer ferromagnetic not gate and schift register*, Science **296**, 2003 (2002).
- [2] K. Nielsch, R. B. Wehrspohn, J. Barthel, J. Kirschner, U. Gösele, S. F. Fischer und H. Kronmüller, *Hexagonally ordered 100 nm period nickel nanowire arrays*, Appl. Phys. Lett. **79**, 1360 (2001).
- [3] R. Hertel, *Computational micromagnetism of magnetization processes in nanowires*, J. Magn. Magn. Mat. **249**, 251 (2002).
- [4] R. Hertel und J. Kirschner, *Magnetization reversal dynamics in nickel nanowires*, Physica B **343**, 206 (2004).
- [5] P. Bruno, *Geometrically constrained magnetic wall*, Phys. Rev. Lett. **83**, 2425 (1999).
- [6] M. Kläui, C. A. F. Vaz, J. Rothman, J. A. C. Bland, W. Wernsdorfer, G. Faini und E. Cambril, *Domain wall pinning in narrow ferromagnetic ring structures probed by magnetoresistance measurements*, Phys. Rev. Lett. **90**, 097202 (2003).
- [7] P.-O. Jubert, R. Allenspach und A. Bischof, *Magnetic domain walls in constrained geometries*, Phys. Rev. B **69**, 220410(R) (2004).
- [8] R. Höllinger, A. Killinger und U. Krey, *Statics and fast dynamics of nanomagnets with vortex structure*, J. Magn. Magn. Mat. **261**, 178 (2003).
- [9] S. Sun, C. B. Murray, D. Weller, L. Folks und A. Moser, *Monodisperse FePt Nanoparticles and Ferromagnetic Nanocrystal Superlattices*, Science **287**, 1989 (2000).

- [10] A. Terheiden, C. Mayer, K. Moh, B. Stahlmecke, S. Stappert, M. Acet und B. Rellunghaus, *Post-deposition organic coating and self-assembly of gas phase prepared FePt nanoparticles on lipid reservoir films*, Appl. Phys. Lett. **84**, 3891 (2004).
- [11] <http://math.nist.gov/oommf/>.
- [12] N. Kazantseva, *Computersimulationen thermisch aktivierter Domänenwände in Nanostrukturen* (Diplomarbeit, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, 2004).
- [13] W. Heisenberg, *Zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Physik **49**, 619 (1928).
- [14] P. A. M. Dirac, *On the theory of quantum mechanics*, Proc. Roy. Soc. **A112**, 661 (1926).
- [15] F. Bloch, *Zur Theorie des Austauschproblems und der Remanenzerscheinung der Ferromagnetika*, Z. Physik **74**, 295 (1932).
- [16] D. L. Landau und E. Lifshitz, *On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*, Phys. Z. Sowjetunion **8**, 153 (1935).
- [17] W. Döring, *Die Temperaturabhängigkeit der Anfangsuszeptibilität von Nickel unter Zug*, Z. Physik **124**, 501 (1948).
- [18] W. Döring, in *Handbuch der Physik*, hrsg. von S. Flügge (Springer Verlag, Berlin, 1966), Vol. XVIII/2.
- [19] W. F. Brown, *Micromagnetics* (Wiley, New York, 1963).
- [20] D. Hinzke, Ph.D. thesis, Gerhard - Mercator - Universität Duisburg, 2002.
- [21] C. J. Schuster, Ph.D. thesis, Universität Bayreuth, 2005.
- [22] R. Zivieri, L. Giovannini und P. Vavassori, in *Magnetic nanostructures*, hrsg. von H. S. Nalwa (American Scientific Publ., Stevenson Ranch, Calif., 2002).
- [23] R. Kikuchi, *On the Minimum of the Magnetization Reversal Time*, J. Appl. Phys. **27**, 1352 (1956).

- [24] T.L. Gilbert und J.M. Kelly, *Proceedings of the Pittsburgh Conference on Magnetism and Magnetic Materials* (Am. Inst. Electr. Engrs., October, 1955), S. 253.
- [25] J. F. Dillon, in *Magnetism*, hrsg. von G. T. Rado und H. Suhl (Academic Press, New York, 1963), Vol. 1, S. 149.
- [26] H. Suhl, *Theory of the magnetic damping constant*, IEEE Trans. Magn. **34**, 1834 (1998).
- [27] V. L. Safonov und H. N. Bertram, *Magnetization reversal as a nonlinear multimode process*, J. Appl. Phys. **85**, 5072 (1999).
- [28] S. Ingvarrson, G. Xiao, S. S. P. Parkin und R. H. Koch, *Tunable magnetization damping in transition metal ternary alloys*, Appl. Phys. Lett. **85**, 4995 (2004).
- [29] A. P. Malozemoff und J. C. Slonczewski, *Magnetic Domain Walls in Bubble Materials* (Academic Press, New York, 1979).
- [30] A. Hubert, *24. IFF - Ferienkurs: Magnetismus von Festkörpern und Grenzflächen* (Forschungszentrum Jülich GmbH KFA, März, 1993), S. 32.1.
- [31] A. Hubert und R. Schäfer, *Magnetic Domains* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [32] J. S. Helman, H. B. Braun, J. S. Broz und W. Baltensperger, *General solution of the Landau-Lifshitz-Gilbert equations linearized around a Bloch wall*, Phys. Rev. B **43**, 5908 (1991).
- [33] A. A. Thiele, *Steady-State Motion of Magnetic Domains*, Phys. Rev. Lett. **30**, 230 (1973).
- [34] R. Arias und D. L. Mills, *Theory of spin excitations and the microwave response of cylindrical ferromagnetic nanowires*, Phys. Rev. B **63**, 134439 (2001).
- [35] B. A. Ivanov und C. E. Zaspel, *Magnon modes for thin circular vortex-state magnetic dots*, Appl. Phys. Lett. **81**, 1261 (2002).
- [36] R. Zivieri und F. Nizzoli, *Theory of spin modes in vortex-state ferromagnetic cylindrical dots*, Phys. Rev. B **71**, 014411 (2005).

- [37] A. G. Gurevich und G. A. Melkov, *Magnetization Oscillations and Waves* (CRC Press, Boca Raton, Florida, 1996).
- [38] D. A. Garanin, *Fokker - Planck and Landau - Lifshitz - Bloch equation for classical ferromagnets*, Phys. Rev. B **55**, 3050 (1997).
- [39] N. Bloembergen, *On the Ferromagnetic Resonance in Nickel and Supermalloy*, Phys. Rev. **78**, 572 (1950).
- [40] H. B. Callen, *A Ferromagnetic Dynamical Equation*, J. Phys. Chem. Solids **4**, 256 (1958).
- [41] C. W. Haas und H. B. Callen, in *Magnetism: A Treatise on Modern Theory and Materials*, hrsg. von G. T. Rado und H. Suhl (Academic Press, New York, 1963), Vol. 1.
- [42] H. J. Mikeska, *Solitons in one-dimensional magnets*, J. Appl. Phys. **52**, 1950 (1981).
- [43] R. K. Dodd, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon und H. C. Morris, *Solitons and Nonlinear Wave Equations* (Academic Press, London, 1982).
- [44] H. How, R. C. O'Handley und F. R. Morgenthaler, *Soliton theory for realistic magnetic domain-wall dynamics*, Phys. Rev. B **40**, 4808 (1989).
- [45] M. Swendsen und H. C. Fogedby, *Phase shift analysis of the Landau-Lifshitz equation*, J. Phys. A **26**, 1717 (1993).
- [46] W. Döring, *Über die Trägheit der Wände zwischen Weißschen Bezirken*, Z. Naturforschung **3a**, 373 (1948).
- [47] W. F. Brown, *Thermal Fluctuations of a single-domain particle*, Phys. Rev. **130**, 1677 (1963).
- [48] W. Scholz, T. Schrefl und J. Fidler, *Micromagnetic simulation of thermally activated switching in fine particles*, J. Magn. Magn. Mat. **233**, 296 (2001).
- [49] C. Presilla, F. Marchesoni und L. Gammaitoni, *Periodically time-modulated bistable systems: Nonstationary statistical properties*, Phys. Rev. A **40**, 2105

- (1989).
- [50] W. Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus 2* (Teubner - Studienbücher: Physik, Stuttgart, 1986).
- [51] U. Nowak, *36. Spring School 2005: Magnetism goes Nano* (Forschungszentrum Jülich, Jülich, 2005).
- [52] M. Suzuki, *Quantum Monte Carlo methods in condensed matter physics* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [53] R. W. Chantrell, J. D. Hannay, M. Wongsam, T. Schrefl und H.-J. Richter, *Computational approaches to thermally activated fast relaxation*, IEEE Trans. Mag. **34**, 1839 (1998).
- [54] O. Chubykalo, J. D. Hannay, M. Wongsam, R. W. Chantrell und J. M. Gonzalez, *Langevin dynamic simulation of spin waves in a micromagnetic model*, Phys. Rev. B **65**, 184428 (2002).
- [55] R. E. Watson, M. Blume und G. H. Vineyard, *Spin Motions in a Classical Ferromagnet*, Phys. Rev. **181**, 811 (1969).
- [56] G. N. Watson, *Three Triple Integrals*, Q. J. Math., Oxford **10**, 266 (1939).
- [57] G. S. Joyce, *Lattice Green function for simple cubic lattice*, J. Phys. A **5**, L65 (1972).
- [58] A. Pelissetto und E. Vicari, *Critical phenomena and renormalization-group theory*, Phys. Rep. **368**, 549 (2002).
- [59] A. Greiner, W. Strittmatter und J. Honerkamp, *Numerical integration of stochastic differential equation*, J. Stat. Phys. **51**, 95 (1988).
- [60] D. E. Wolf, in *Advances in Computer Simulation*, hrsg. von I. Kondor und J. Kertész (Springer, Heidelberg, 1998), S. 104.
- [61] J. L. García-Palacios und F. J. Lázaro, *Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles*, Phys. Rev. B **58**, 14937 (1998).

- [62] U. Nowak, R. W. Chantrell und E. C. Kennedy, *Monte Carlo simulation with time step quantification in terms of Langevin dynamics*, Phys. Rev. Lett. **84**, 163 (2000).
- [63] U. Nowak, in *Annual Reviews of Computational Physics IX*, hrsg. von D. Stauffer (World Scientific, Singapore, 2001), S. 105.
- [64] F. Vesely, *Computational Physics* (Universitätsverlag, Wien, 1993).
- [65] D. N. Zubarev, *Double-time Green Functions in statistical physics*, Sov. Phys. Usp. **3**, 320 (1960).
- [66] S. W. Tyablikov, *Quantentheoretische Methoden des Magnetismus* (B. G. Teubner, Stuttgart, 1969).
- [67] P. Fröbrich, P. Jensen und P. Kuntz, *Field-induced magnetic reorientation and effective anisotropy of a ferromagnetic monolayer within spin wave theory*, Eur. Phys. J. B **13**, 477 (2000).
- [68] N. Kazantseva, R. Wieser und U. Nowak, *Transition to Linear Domain Walls in Nanoconstrictions*, Phys. Rev. Lett. **94**, 037206 (2005).
- [69] H. Forster, T. Schrefl, D. Suess, W. Scholz, V. Tsiantos, R. Dittrich und J. Fidler, *Domain wall motion in nano-wires using moving grids*, J. Appl. Phys. **91**, 6914 (2002).
- [70] R. Wieser, U. Nowak und K. D. Usadel, *Domain wall mobility in nanowires: transverse vs. vortex walls*, Phys. Rev. B **69**, 064401 (2004).
- [71] R. Wieser, U. Nowak und K. D. Usadel, *Domain wall motion in nanowires*, Phase Transitions **78**, 115 (2005).
- [72] U. Enz, *Discrete Mass, Elementary Length, and a Topological Invariant as a Consequence of a Relativistic Invariant Variational Principle*, Phys. Rev. **131**, 1392 (1963).
- [73] U. Enz, *Die Dynamik der Blochschen Wand*, Helv. Phys. Acta **37**, 245 (1964).
- [74] N.L. Schryer und L.R. Walker, *The motion of 180° domain walls in uniform*

- dc magnetic fields*, J. Appl. Phys. **45**, 5406 (1974).
- [75] K. Heuer, Ph.D. thesis, Gerhard - Mercator - Universität - Gesamthochschule Duisburg, 1990.
- [76] I. G. Gochev, *Contribution to the theory of plane domain walls in a ferromagnet*, Sov. Phys. JETP **58**, 115 (1983).
- [77] F. Bloch, *Zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Physik **61**, 206 (1930).
- [78] H. Bethe, *Zur Theorie der Metalle*, Z. Physik **71**, 205 (1931).
- [79] C. Kittel, *On the Theory of Ferromagnetic Resonance Absorption*, Phys. Rev. **73**, 155 (1948).
- [80] J. M. Winter, *Bloch Wall Excitation. Application to Nuclear Resonance in a Bloch Wall*, Phys. Rev. **124**, 452 (1961).
- [81] J. F. Janak, *Quantum Theory of Domain-Wall Motion*, Phys. Rev. **134**, A411 (1964).
- [82] H. B. Braun, *Fluctuations and instabilities of ferromagnetic domain-wall pairs in an external magnetic field*, Phys. Rev. B **50**, 16485 (1994).
- [83] M. B. Fogel, S. E. Trullinger, A. R. Bishop und J. A. Krumhansl, *Classical Particlelike Behavior of Sine-Gordon Solitons in Scattering Potentials and Applied Fields*, Phys. Rev. Lett. **36**, 1411 (1976).
- [84] G. Reinisch und J. C. Fernandez, *Specific sine-Gordon soliton dynamics in the presence of external driving forces*, Phys. Rev. B **24**, 835 (1981).
- [85] R. L. Jaffe, *An Algebraic Approach to Reflectionless Potentials in One Dimension*, lecture: Quantum Physics III, Spring 1998.
- [86] R. Wieser, *Private Mitteilung an R. Hertel*, 2004.
- [87] R. Hertel, W. Wulfhekel und J. Kirschner, *Domain-Wall Induced Phase Shifts in Spin Waves*, Phys. Rev. Lett. **93**, 257202 (2005).
- [88] A. V. Ferrer, P. F. Farinas und A. O. Caldeira, *One-Dimensional Gapless*

- Magnons in a Single Anisotropic Ferromagnetic Nanolayer*, Phys. Rev. Lett. **91**, 226803 (2003).
- [89] D. Bouzidi und H. Suhl, *Motion of a Bloch domain wall*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2587 (1990).
- [90] R. Wieser, U. Nowak und K. D. Usadel, *The Role of Spin Waves for Domain Wall Motion*, 2005, in Arbeit.
- [91] P. B. Visscher, O. Traistaru, D. M. Apalkov und X. Feng, *Visualization of spin waves during switching simulation*, J. Appl. Phys. **91**, 7544 (2002).
- [92] A. M. Kosevich, B. A. Ivanov und A. S. Kovalev, *Magnetic Solitons*, Phys. Rep. **194**, 117 (1990).
- [93] D. G. Porter und M. J. Donahue, *Velocity of Transverse Domain Wall Motion Along Thin, Narrow Stripes*, J. Appl. Phys. **95**, 6729 (2004).
- [94] L. N. Bulaevskii und V. L. Ginzburg, *Temperature dependence of the shape of the domain wall in ferromagnetics and ferroelectrics*, Sov. Phys. JETP **18**, 530 (1964).
- [95] L. N. Bulaevskii und V. L. Ginzburg, *Structure of domain wall in weak ferromagnets*, ZhETF Pis. Red. **11**, 404 (1970).
- [96] A. Hucht, *Private Mitteilung*, 2004.
- [97] M. Kläui *et al.*, *Direct observation of domain-wall pinning at nanoscale constrictions*, Appl. Phys. Lett. **87**, 102509 (2005).
- [98] A. Himeno, T. Okuno, S. Kasai, T. Ono, S. Nasu, K. Mibu und T. Shinjo, *Propagation of a magnetic domain wall in magnetic wires with asymmetric notches*, J. Appl. Phys. **97**, 066101 (2005).
- [99] N. D. Mermin und H. Wagner, *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133, 1307 (1966).
- [100] D. A. Garanin, *Dynamics of elliptic domain walls*, Physica A **178**, 467 (1991).

- [101] J. Kötzler, D. A. Garanin, M. Hartl und L. Jahn, *Evidence for Critical Fluctuations in Bloch Walls near Their Disordering Temperature*, Phys. Rev. Lett. **71**, 177 (1993).
- [102] D. A. Garanin, *Generalized Equation of Motion for a Ferromagnet*, Physica A **172**, 470 (1991).
- [103] R. Höllinger, Ph.D. thesis, Universität Regensburg, 2004.
- [104] M. E. Gouvea, G. M. Wysin, A. R. Bishop und F. G. Mertens, *Vortices in the classical two-dimensional anisotropic Heisenberg model*, Phys. Rev. B **39**, 11840 (1989).
- [105] Y. Gaididei, T. Kamppeter, G. M. F. und A. Bishop, *Noise-induced switching between vortex states with different polarization in classical two-dimensional easy-plane magnets*, Phys. Rev. B **59**, 7010 (1999).
- [106] O. N. Mryasov, U. Nowak, K. Guslienko und R. W. Chantrell, *Temperature dependent properties of FePt: effective spin Hamiltonian model*, Europhys. Lett. **69**, 805 (2005).
- [107] O. N. Mryasov, V. A. Gubanov und A. I. Liechtenstein, *Spiral-spin-density-wave states in fcc iron: Linear-muffin-tin-orbitals band-structure approach*, Phys. Rev. B **45**, 12330 (1992).
- [108] A. B. Shick und O. N. Mryasov, *Coulomb correlations and magnetic anisotropy in ordered L_{10} CoPt and FePt alloys*, Phys. Rev. B **76**, 172407 (2003).
- [109] E. R. Callen und H. B. Callen, *The present status of the temperature dependence of magnetocrystalline anisotropy, and the $l(l+1)/2$ power law*, J. Phys. Chem. Solids **27**, 1271 (1966).
- [110] R. Skomski, A. Kashyap und D. J. Sellmyer, *Finite-Temperature Anisotropy of PtCo Magnets*, IEEE Trans. Magn. **39**, 2917 (2003).
- [111] D. A. Garanin und O. Chubykalo-Fesenko, *Thermal fluctuations and longitudinal relaxation of single-domain magnetic particles at elevated temperatures*,

- Phys. Rev. B **70**, 212409 (2004).
- [112] U. Nowak, O. N. Mryasov, R. Wieser, K. Guslienko und R. W. Chantrell, *Spin dynamics of magnetic nanoparticles: Beyond Brown's theory*, Phys. Rev. B **72**, 172410 (2005).
- [113] S. Okamoto, N. Kikuchi, O. Kitakami, T. Miyazaki, Y. Shimada und K. Fukamichi, *Chemical-order-dependent magnetic anisotropy and exchange stiffness constant of FePt (001) epitaxial films*, Phys. Rev. B **66**, 24413 (2002).
- [114] H. T. Diep, *Quantum effects in Heisenberg antiferromagnetic thin films*, Phys. Rev. B **43**, 8509 (1991).
- [115] A. Moschel und K. D. Usadel, *Magnetization of coupled ferromagnetic and antiferromagnetic films: Dependence on the interface coupling*, Phys. Rev. B **48**, 13991 (1993).
- [116] V. T. Ngo and H. V. Nguyen and H. T. Diep and V. L. Nguyen, *Magnetic properties of exchange-biased-three-layer films in a perpendicular magnetic field*, Phys. Rev. B **69**, 134429 (2004).
- [117] A. Hucht, Ph.D. thesis, Gerhard - Mercator - Universität - Gesamthochschule Duisburg, 1999.
- [118] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, Cambridge, 1990).

Eigene Veröffentlichungen

Auf den folgenden Seiten befinden sich Nachdrucke bzw. Vorabdrucke von den eigenen Publikationen. Die Veröffentlichungen sind sortiert in der Reihenfolge ihres Erscheinens.

Publikationen im Zusammenhang mit dieser Arbeit:

- R. Wieser, U. Nowak und K. D. Usadel, *Domain wall mobility in nanowires: transverse versus vortex walls*, Phys. Rev. B **69**, 064401 (2004), Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology **9** (2004)
- R. Wieser, U. Nowak und K. D. Usadel, *Domain wall motion in nanowires*, Phase Transitions **78**, 115 (2005)
- N. Kazantseva, R. Wieser und U. Nowak, *Transition to linear domain walls in nano-constrictions*, Phys. Rev. Lett. **94**, 037206 (2005), Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology **11** (2005)
- U. Nowak, O.N. Mryasov, R. Wieser, K. Guslienko und R.W. Chantrell, *Spin dynamics of magnetic nanoparticles: Beyond Brown's theory*, Phys. Rev B **72**, 172410 (2005)
- R. Wieser, U. Nowak und K. D. Usadel, *Thermodynamic behavior of nanomagnets with vortex configuration*, Phys. Rev. B (2006), Eingereicht

Weitere Veröffentlichungen:

- D. Reuter, S. Hoch, A. D. Wieck, B. Hausmanns, B. Stahlmecke, G. Dumpich, R. Wieser, and U. Nowak, *Hall-magnetometry on Co, Fe, and Py nanowires*, J. Magn. Magn. Mater. **272**, 1654 (2004)
- M. van Kampen, I. L. Soroka, R. Brucas, B. Hjörvarsson, R. Wieser, K. D. Usadel, M. Hanson, O. Kazakova, J. Grabis, H. Zabel, C. Jozsa und B. Koopmans, *On the realization of artificial XY spin chains*, J. Phys. C **17**, L27 (2005), <http://Select.iop.org>
- Abbildungen in U. Nowak, *Localized Moments: Finite Temperature*, 36. Spring School: Magnetism goes Nano, Forschungszentrum Jülich 2005

- M. Brands, R. Wieser, D. Hinzke und G. Dumpich, *Reversal processes and domain wall pinning in polycrystalline Co-nanowires* Phys. Rev. B (2005), Eingereicht

Danksagung

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

an Dr. habil. Sven Lübeck und Dr. Alfred Hucht für die vielen Tips und Hinweise und an alle Mitarbeiter der Theoretischen Tieftemperaturphysik für das angenehme und freundschaftliche Arbeitsklima.

an Dr. M. Kläui, Dipl. Phys. C. Bayer und Dipl. Phys. M. Bolte für zahlreiche anregende Diskussionen. Besonders danken möchte ich auch Prof. R. W. Chantrell für die Ermöglichung meines Aufenthaltes bei der Theorieabteilung von Seagate Research in Pittsburgh.

an die Mitarbeiter der Theoretischen Tieftemperaturphysik für das sehr gute Arbeitsklima

an Ch. Koczy und N. Engelen für das Korrekturlesen meiner Arbeit

an die Deutsche Forschungsgemeinschaft, die die Entstehung dieser Arbeit im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 491: *Magnetische Heteroschichten: Struktur und elektronischer Transport* gefördert hat.

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