

Mikromagnetische Simulationen von kleinen Strukturen

Von dem Fachbereich Maschinenbau
der Universität Hannover
zur Erlangung des Grades

Doktor-Ingenieur
genehmigte
Dissertation

von
Dipl.-Ing. S. A. Zielke
geboren am 04.05.71
in Garmisch-Partenkirchen

Vorsitz: Prof. Dr.-Ing. D. Besdo
Referent: Prof. Dr.-Ing. H. H. Gatzert
Koreferent: Prof. Dr.-Ing. H.-D. Stölting
Tag der Prüfung: 24.09.99

Abstract

Mikromagnetische Simulationen von kleinen Strukturen

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Entwicklung von Methoden zur Effizienzsteigerung in der mikromagnetischen Simulationstechnik und mit Untersuchungen an dünnen Schichtstrukturen und kleinen Würfelementen. Bei den effizienzsteigernden Maßnahmen gilt es, den sehr hohen Rechenzeit- und Speicherbedarf zu reduzieren, um die Berechnung von großen Modellen zu ermöglichen. Bei dreidimensionalen Simulationen wird dies durch eine Parallelisierung der Streufeldberechnung und ihre Anwendung auf Mehrprozessor-Rechnern ermöglicht. Weiterhin wird eine Mehrfachgittermethode vorgestellt, bei der mehrere unterschiedlich fein diskretisierte Gitter miteinander gekoppelt werden. Das entwickelte Verfahren beschränkt sich in dieser Arbeit auf zweidimensionale Simulationen. Die Besonderheit dieser Methode ist es, bei der Streufeldberechnung die Fast-Fourier-Transformation für jedes Gitter getrennt anwenden zu können. Die Ergebnisse der Einzelgitter werden durch einen besonderen Algorithmus gekoppelt. Die Verifikation erfolgt anhand einer Testfunktion. Zusätzlich zu den effizienzsteigernden Methoden werden computergestützte, mikromagnetische Untersuchungen an Strukturen durchgeführt, deren Abmessungen im unteren Mikrometerbereich liegen. Die geometrischen Objekte sind dünne Schichtstrukturen, bei denen eine der drei Kantenlängen sehr klein im Gegensatz zu den anderen ist, und kleine Würfelemente. Die Untersuchungen werden erst ohne ein externes, magnetisches Feld vorgenommen, um die Magnetisierungsanordnungen von metastabilen Zuständen zu finden und vergleichen zu können. Anschließend wird ein externes Feld berücksichtigt und dessen Auswirkung auf die mittlere Magnetisierung verfolgt. Die durch die Variation eines externen Feldes entstehenden Schaltvorgänge werden systematisch aufgezeigt. Die hierbei verwendeten Vorgehensweisen werden detailliert beschrieben und können allgemein verwendet werden. Weiterhin werden durch die Berechnung der magnetoresistiven Eigenschaften in der mikromagnetischen Simulation der dünnen Schichten Kennlinien gewonnen, die für die Anwendung solcher Schichten in magnetoresistiven Sensoren nützlich sind.

Abstract

Micromagnetic Simulations of small Structures

This work focuses on the development of methods to increase the efficiency of micromagnetic simulations. In addition it deals with investigations on thin films and small particles. The goal of the efficiency increasing methods is to decrease the time needed for calculation and the used memory. This is necessary to enable the calculation of large models. For three-dimensional calculations this is carried out by doing a parallel calculation of the strayfieldenergie using a multiprocessor computer. In addition a multigrid method is presented that couples various differently fine discretised grids. This developed procedure is limited to two dimensions. The specialty of this method is that the strayfieldenergy can be calculated for each grid separately using the fast-fourier-transformation. The results of the grids are coupled using a special algorithm. The verification is carried out using a testfunction. In addition to these methods to increase the efficiency, micromagnetic investigations of structures are presented. These structures show dimensions in the micrometer range. The shape of these objects are thin films and small particles. First the calculations are made without using an external field. This is done to find and compare the metastable magnetic Configurations. In the following an external field is taken into account and its influence on the average magnetization is monitored. The switching behavior resulting from the variation of the external field is systematically investigated. The procedure used is described in detail and can be applied in general. In addition magnetoresistive characteristics are calculate for the thin films. The application for which these results can be used are magnetoresistive sensors.

Schlagworte: Mikromagnetismus, Simulation, Domänen

Keywords: Micromagnetism, Simulation, Domains

.....	Formelzeichen und Abkürzungen	VI
1	Einleitung	1
2	Stand der Kenntnisse	3
2.1	Theorie des Mikromagnetismus	3
2.1.1	Energien	4
2.1.2	Statische, mikromagnetische Differentialgleichung	8
2.1.3	Effektives, magnetisches Feld	8
2.1.4	Randbedingungen	9
2.1.5	Dynamische, mikromagnetische Differentialgleichung	9
2.2	Numerische Beschreibung des Mikromagnetismus	10
2.2.1	Finite-Elemente Diskretisierung	10
2.2.2	Streifeldenergie	11
2.2.3	Verfahren zur Minimierung der Energie	15
2.3	Domänenwände	16
2.3.1	Blochwand	17
2.3.2	Neelwand	18
2.3.3	Stachelwand (Crosstie)	19
2.3.4	Ausgleich von Winkelunterschieden	20
2.3.4 a	180 Grad Wände	20
2.3.4 b	90 Grad Wände	21
2.3.5	Phasendiagramm von Domänenwänden	21
2.4	Domänen in dünnen Schichten mit geringer Anisotropie	22
2.5	Schalten kleiner Teilchen	25
2.5.1	Stoner-Wohlfarth Modell	25
2.5.2	Asymmetrisches Schalten	28
2.5.3	Kontinuierliches Schalten zweiter Ordnung	29
2.5.4	Unvorhergesehenes, katastrophales Schalten	30
2.6	Magneto-resistiver Effekt	30
3	Aufgabenstellung und Zielsetzung	33
4	Vorgehensweise	34
5	Grenzen und Möglichkeiten der Modellierung	35
5.1	Einleitung	35
5.2	Beschreibung des verwendeten Simulationsprogrammes	35
5.3	Grenzen des verwendeten Simulationsprogrammes	38
5.4	Parallelisierung bei dreidimensionalen Simulationen	38
5.4.1	Ein- und mehrdimensionale Fast-Fourier-Transformationen (FFT)	39
5.4.2	Parallelisierung der Fast-Fourier-Transformationen	43
5.5	Mehrfachgittermethode bei zweidimensionalen Simulationen	45
5.5.1	Streifeldenergie eines Mehrfachgitters	47
5.5.2	Definition einer Testfunktion	49
5.5.3	Vergleich und Bewertung der Verfahren	52

6 Simulation dünner Schichtstrukturen	57
6.1 Vorgehensweise	58
6.2 Magnetische Grundkonfigurationen ohne externe Erregung	59
6.2.1 Vorgehensweise	59
6.2.2 Nullfeld-Konfigurationen	64
6.2.3 Position der Wirbel	66
6.2.4 Längenabhängigkeit der Gesamtenergie	69
6.2.5 Kritische Größe des Spreizzustandes	71
6.2.6 Stabilität des Spreizzustandes	72
6.3 Verlauf der Magnetisierung bei horizontaler Erregung	75
6.3.1 Übergang vom Spreizzustand in die Zustände C und S	75
6.3.2 Bestimmung des Schaltfeldes mittels der Suszeptibilitätsmethode	78
6.3.3 Hystereseverlauf	80
6.4 Verlauf der Magnetisierung bei vertikaler Erregung	81
6.4.1 Übergang von einer ein- zu einer mehrdomänigen Konfiguration	81
6.4.2 Magnetisierungsverlauf für verschiedene Längenverhältnisse	83
6.5 Magnetoresistive Eigenschaften	85
7 Simulation von kleinen Würfelementen	90
7.1 Vorgehensweise	91
7.2 Magnetische Grundkonfigurationen ohne externe Erregung	92
7.2.1 Spreizzustand	92
7.2.2 Symmetrischer Wirbel (Vortex)	93
7.2.3 Asymmetrischer Wirbel (Vortex)	94
7.2.4 Mehrdomänige Wirbelkonfigurationen	94
7.2.5 Phasendiagramm der Grundkonfigurationen	95
7.3 Schaltvorgänge im senkrechten Feld	96
7.3.1 Homogene Rotation	97
7.3.2 Kontinuierliche Verdrillung	100
7.3.3 Katastrophale Verdrillung	101
7.3.4 Schwach kontinuierliche Verdrillung	105
7.4 Schaltvorgänge im schrägen Feld	107
7.4.1 Kontinuierliche Verdrillung	107
7.4.2 Schwache, kontinuierliche Verdrillung	110
8 Diskussion der Ergebnisse und Ausblick	112
8.1 Effizienzsteigernde Methoden	112
8.2 Untersuchungen an dünnen Schichtstrukturen	113
8.3 Untersuchungen an kleinen Würfelementen	113
8.4 Einschränkung der Aussagefähigkeit	113
8.5 Ausblick	114
9 Zusammenfassung	116
10 Literatur	118

Formelzeichen und Abkürzungen

Abkürzungen	Bezeichnung	Einheit
a	Parameter einer Testfunktion	-
A	Austauschsteifigkeitskonstante	J/m
$A(x,y)$	magnetisches Vektorpotential	A/m
b	Parameter einer Testfunktion	-
B	Breite der Schicht	m
C_i	Austauschkopplungskonstanten	J/m
D	Schichtdicke	m
e	reduzierte Energiedichte	J/m ³
\hat{e}	diskretisierte, reduzierte Energiedichte	-
e_{Kc}, e_{Ku}, e_{Ko}	reduzierte, kristalline Anisotropieenergie (kubisch, uniaxial, orthorhombisch)	-
e_{kopp}	reduzierte Austauschkopplungsenergie	-
e_s	Oberflächenanisotropie	-
e_{tot}	reduzierte Gesamtenergie	-
E	Energie	J
\hat{E}	diskretisierte Energie	J
E_{an}	Anisotropieenergie	J
E_d	Streifeldenergie	J
E_{ex}	Austauschkopplungsenergie	J
E_{ges}	Gesamtenergie	J
E_H	Zeeman Energie	J
$f(x)$	Ortsfunktion	m
f_L	Lagrangian Parameter	-
$F(s)$	Frequenzfunktion	s
F_{an}	Anisotropiefunktional	J/m ³

$g(\varphi)$	generalisierte Anisotropiefunktional	-
h	reduzierte, magnetische Feldstärke	-
h_c	reduzierte Koerzitivfeldstärke	-
h_{eff}	reduziertes, effektives, magnetisches Feld	-
h_h	reduzierte, horizontale Komponente des magnetischen Feldes	-
h_{krit}	reduziertes, kritisches, magnetisches Feld	-
h_s	reduziertes Schaltfeld	-
h_v	reduzierte, vertikale Komponente des magnetischen Feldes	-
H	Höhe der Schicht	m
H_C	Koerzitivfeldstärke	A/m
H_d	Streufeld	A/m
H_{eff}	effektives, magnetisches Feld	A/m
H_{ex}	externes, magnetisches Feld	A/m
H_h	horizontale Komponente des magnetischen Feldes	A/m
H_K	Anisotropiefeld	A/m
H_{krit}	kritisches Feld	A/m
H_{mag}	Magnetische Feldstärke	A/m
H_v	vertikale Komponente des magnetischen Feldes	A/m
I	elektrischer Strom	A
J	Polarisation	T
J_s	Sättigungspolarisation	T
K_{ci}	Komponente i der kubischen Anisotropiekonstanten	J/m ³
K_d	Streufeldkonstante	J/m ³
K_i	Komponente i der orthorhombischen Anisotropiekonstanten	J/m ³

K_{ui}	Komponente i der uniaxialen Anisotropiekonstante	J/m^3
l_{krit}	kritische Länge	m
L	Länge der Schicht	m
L_I, L_{II}	Länge der Gitter I und II	m
L_W	Wirbelposition	m
m	reduzierte Magnetisierung	-
\bar{m}	gemittelte Magnetisierung	-
m'	Magnetisierung an der Grenzfläche eines benachbarten Mediums	-
m_{alt}	reduzierte Magnetisierung vor einem Iterationsschritt	-
m_{neu}	reduzierte Magnetisierung nach einem Iterationsschritt	-
m_i, m_k	Komponente i , bzw. k der auf M_s reduzierten Magnetisierung	-
M	Magnetisierung	A/m
M	Anzahl der Elemente	-
M_s	Sättigungsmagnetisierung	A/m
n	Normalenvektor	-
N	Anzahl der Elemente	-
Q	reduzierte Materialeigenschaft	-
r, r'	Ortskoordinate	m
R	elektrischer Widerstand	Ω
S	Oberfläche	m^2
S	Grad der Symmetrie	-
T	magnetisches Moment	A^2/m^2
U	Überdeckungsgrad	-
V	Volumen	m^3
w	Wandweite	m
W	Wechselwirkung	1/m
x, x'	Raumrichtung und Ortskoordinate	m

y	Raumrichtung und Ortskoordinate	m
z	Raumrichtung und Ortskoordinate	m
β	phänomenologischer Dämpfungsparameter	-
γ	gyromagnetischer Faktor	m/As
η	Verdrillungswinkel	°
ϵ_{tot}	reduzierte Gesamtenergie	-
θ	Winkel	°
λ	reduzierte Kantenlänge	-
λ_V	magnetische Volumenladungsdichte	Wb/m ³
μ_0	relative Permeabilitätszahl	Wb/(A*m)
ρ	spezifischer Widerstand	Ω m
σ, σ_S	magnetische Oberflächenladungsdichte	Wb/m
φ	Winkel	°
Φ, Φ_d	magnetisches Potential	Wb/m ³
χ	Suszeptibilität	-

1 Einleitung

Wie in vielen technischen Bereichen, werden auch in der Mikrotechnologie numerische Methoden zum Entwurf von kompletten Systemen und ihrer Komponenten eingesetzt. Ein weitverbreitetes Verfahren ist die Finite-Elemente Methode. Ihr Einsatz zur magnetischen Analyse ist Stand der Technik und bereits in einer Vielzahl von kommerziell erhältlichen Programmen umgesetzt. Die zugrunde gelegte Theorie, basierend auf den klassischen *Maxwellschen* Gleichungen, beschreibt die magnetischen Merkmale als eine über ein Volumen gemittelte Eigenschaft. Die Größe des Volumens bestimmt, inwieweit inhomogene Magnetisierungen aufgelöst werden können. Diese Inhomogenitäten beschränken sich aber immer auf ein Gebiet, welches in makroskopischen Dimensionen, d.h. Größen deutlich oberhalb von Mikrometern, liegt. In der Mikrotechnologie treten Strukturen auf, deren Abmessungen im mikroskopischen Bereich liegen. Die Besonderheit in diesen Dimensionen ist, daß sogenannte *magnetische Domänen* aufgelöst werden. Dies sind ebenso Inhomogenitäten in der Magnetisierungsverteilung, die jedoch einem anderen physikalischen Effekt, dem *Mikromagnetismus*, zugrunde liegen und somit nicht klassisch beschrieben werden können. Die hierfür notwendige Technik ist die *mikromagnetische Simulation* (Vergleich der magnetischen Theorien in [Bild 1.1](#)). Ihre Anwendung beinhaltet die numerische Lösung einer stark *nichtlinearen* und insbesondere *nichtlokalen* Feldgleichung. Die sogenannte *Streufeldenergie* ist der Grund für die genannte Nichtlokalität. Der Ursprung liegt in der weitreichenden Wirkung magnetischer Ladungen, d.h. jeder Punkt im Raum beeinflusst jeden anderen Punkt im Raum in einer definierten Wechselbeziehung. Diesen Zustand numerisch zu erfassen, bedarf einer hohen Effizienz der Berechnungsmethoden. Darüberhinaus existieren bei solchen Phänomenen eine Vielzahl von Lösungen, die alle durch eine Metastabilität der Energien erkannt werden können und getrennt voneinander berechnet werden müssen.

Die vorliegende Arbeit berichtet über eigene Entwicklungen zur Effizienzsteigerung mikromagnetischer Simulationen. Außerdem zeigt sie die Anwendung der Simulationstechnik an zwei Beispielen mit einfacher Geometrie. Das erste sind dünne Schichtstrukturen, bei denen eine der drei Kantenlängen sehr klein ist. Als zweites werden kleine Würfelemente untersucht. Diese geometrischen Formen lassen sich in einer Vielzahl von mikrotechnischen Systemen finden. Desweiteren werden *magne-*

toresistive Eigenschaften in den Untersuchungen berücksichtigt. Diese werden häufig bei mikrotechnischen Sensoren eingesetzt.

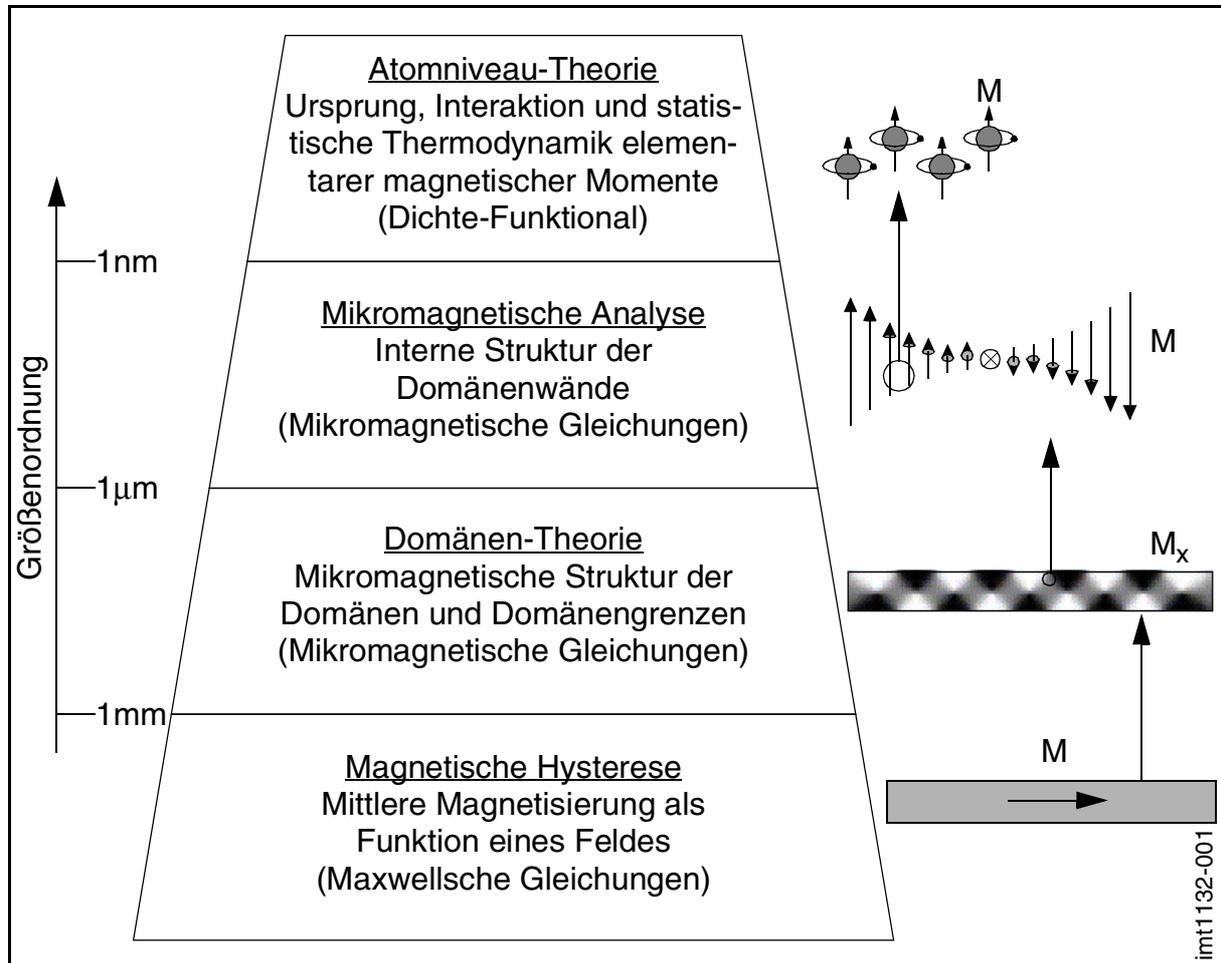


Bild 1.1: Magnetische Theorien aufgelistet nach ihrer größenabhängigen Gültigkeit

2 Stand der Kenntnisse

2.1 Theorie des Mikromagnetismus

Bei der numerischen Berechnung des Magnetismus in einem Mikrosystem, bestimmt die notwendige Auflösung die geeignete Theorie (vgl. [Bild 1.1](#)). In der konventionellen Magnetik beschreiben die *Maxwellschen* Gleichungen [BOZ78] die Magnetisierung als eine über das Volumen gemittelte Größe. Die Anwendung dieser Theorie gilt für Strukturen, deren Abmessungen oberhalb von einigen Millimetern liegen. Bei Strukturen im Nanometer- bis Mikrometerbereich sind diese Vereinfachungen nicht mehr zulässig. Hier werden magnetische Inhomogenitäten aufgelöst, die entscheidend das Systemverhalten beeinflussen. Die Bereiche mit homogener Magnetisierung werden *Domänen* genannt. Sie können zueinander eine unterschiedliche Orientierung besitzen. Die Rotation der Magnetisierung zwischen den Domänen beschränkt sich auf den Bereich der Domänenwand. Die auf diesen Erkenntnissen basierende Theorie wird als *Theorie des Mikromagnetismus* oder *Domänentheorie* bezeichnet. Wie in den Maxwellschen Gleichungen, so wird auch in der Theorie des Mikromagnetismus die Zustandsgröße Magnetisierung als kontinuierliche Feldgröße beschrieben und ist somit eine Kontinuumstheorie. Vergrößert man allerdings die Auflösung noch weiter bis unterhalb des Nanometerbereiches, so ist die Berechtigung zur Verwendung der Kontinuumstheorie nicht gegeben. Es treten nun Effekte auf, die sich lediglich auf dem atomaren Niveau beschreiben lassen. Hier spielt beispielsweise die Wechselwirkung, die Anordnung und die statistische Thermodynamik von elementaren, magnetischen Momenten eine Rolle. Die kleinen Dimensionen mikrotechnischer Bauteile liegen in Größen, die zu klein für die Anwendung der klassischen Maxwellschen Gleichungen sind, aber groß genug, damit eine Berechnung auf dem atomaren Niveau vermieden werden kann. Die mikromagnetische Theorie basiert auf Überlegungen von *Landau* und *Lifshitz* [LAN35], die mittels eines Variationsansatzes die mikromagnetischen Differentialgleichungen entwickelten. Diese vernachlässigten zunächst noch die exakte Berücksichtigung der *Streifeldenergie* (Kapitel 2.1.1) und beschränkten sich zudem auf den eindimensionalen Fall. Eine endgültige Formulierung der Gleichungen in drei Dimensionen und inklusive einer vollständigen Beschreibung der Streifeldenergie lieferte *Brown* in [BRO63a]. Da zum Verständnis des numerischen Mikromagnetismus ein hohes Maß an Theorie notwendig ist, wird diese

im folgenden erläutert. Durch Einführung der relevanten Energien kann eine Differentialgleichung entwickelt werden (Kapitel 2.1.2). Sie entspricht den zuvor erwähnten *Brownschen Gleichungen*. Im Anschluß werden das für die Numerik notwendige effektive Feld (Kapitel 2.1.3) sowie die Randbedingungen (Kapitel 2.1.4) vorgestellt. Durch die Einführung des effektiven Feldes können die statischen *Brownschen Gleichungen* in eine dynamische Differentialgleichung, die *Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung*, überführt werden (Kapitel 2.2.3).

2.1.1 Energien

Die mikromagnetische Theorie stützt sich auf die Annahme, daß die Magnetisierung durch ein Vektorfeld $\mathbf{J}(\mathbf{r})$, unter der Bedingung konstanten Betrags, dargestellt werden kann [DÖR66], [KRO66]:

$$|\mathbf{J}(\mathbf{r})| = J_s \quad (2.1)$$

J_s stellt eine Materialeigenschaft dar, die *Sättigungspolarisation* genannt wird, und \mathbf{r} wird für die Ortskoordinate verwendet. Ihr gegenüber steht die Sättigungsmagnetisierung M_s mit $J_s = \mu_0 * M_s$, wobei μ_0 die Permeabilität des Vakuums bezeichnet. Das Vektorfeld läßt sich mit Hilfe der Einheitsmagnetisierung $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ und der entsprechenden Randbedingung normiert ausdrücken:

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}(\mathbf{r})/M_s, \text{ mit } |\mathbf{m}(\mathbf{r})| = 1. \quad (2.2)$$

Zur Verwendung einer Variationsrechnung müssen die verschiedenen Energieausdrücke unter Verwendung von $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ formuliert werden. Die Energien werden im folgenden noch im Detail erläutert. Unterschieden wird hier vorab zwischen *lokalen* und *nichtlokalen* Energien. Lokale Energien sind ausschließlich abhängig von der lokalen Magnetisierungsrichtung $\mathbf{m}(\mathbf{r})$. Hierzu zählen die Anisotropieenergie, welche die Abhängigkeit bezüglich der strukturellen Achsen beschreibt, und die Zeeman Energie, welche die Beeinflussung durch ein externes, magnetisches Feld angibt. Die Austauschkopplungsenergie, oder auch Steifigkeitsenergie genannt, kann ebenfalls als lokale Energie interpretiert werden, da sie abhängig von einer lokalen Funktion der Ableitungen der Magnetisierungsrichtung ist. Sie beschreibt die Abhängigkeit von einer homogenen Verteilung der Magnetisierungen. Als nichtlokaler Energieausdruck wird die Streufeldenergie bezeichnet, welche in jedem Punkt abhängig von der Magnetisie-

ungsrichtung aller anderen Punkte im Raum ist. Magnetoelastische bzw. magnetostruktive Energien, welche die Abhängigkeit gegenüber mechanischen Spannungen beschreiben, werden in dieser Arbeit vernachlässigt. Die vier vorgestellten und relevanten Energieterme werden nun im einzelnen beschrieben. Gekennzeichnet werden die Energien mit „ E “. Wird die Energie auf das Volumen der Struktur bezogen, so wird dies durch die reduzierte Energiedichte „ e “ dargestellt.

Austauschkopplungsenergie

Die Abweichung der Magnetisierungsrichtung von einer homogenen Ausrichtung wird durch einen Anstieg der Austauschkopplungsenergie E_{ex} unterdrückt. Diesen Zusammenhang beschreibt Gl. 2.3 [LAN35].

$$E_{ex} = A \int (\mathbf{grad} \mathbf{m})^2 dV = A \int [(\mathbf{grad} m_x)^2 + (\mathbf{grad} m_y)^2 + (\mathbf{grad} m_z)^2] dV \quad (2.3)$$

A ist ein Materialparameter, welcher Austauschsteifigkeitskonstante genannt wird. Falls unterschiedliche ferromagnetische Materialien in Kontakt miteinander liegen, wie z.B. bei Multischichtsystemen, kann eine Austauschkopplung an der Grenzschicht auftreten. Für die Energiedichte gilt dann:

$$e_{ex} = C_{bl}(1 - m_1 \cdot m_2) + C_{bq}[1 - (m_1 \cdot m_2)^2] \quad (2.4)$$

Die Größen m_1 und m_2 sind die Magnetisierungen in der Kontaktzone. Die Wahl der bilinearen (C_{bl}) und der biquadratischen (C_{bq}) Kopplungskonstanten bevorzugt nun entsprechend die Zustände paralleler Anordnung bei positivem C_{bl} (ferromagnetische Austauschkopplung), oder die der antiparallelen Anordnung bei negativem C_{bl} (antiferromagnetische Austauschkopplung). Auch eine um 90° rotierte Anordnung ist möglich. Hierzu muß C_{bq} negativ und C_{bl} klein sein. Eine systematische Beschreibung der Austauschkopplung wird von *Döring* gegeben [DÖR66]. Kopplungszustände von Mehrschichten werden von *Bruno* in [BRU95] und *Slonczewski* [SLO95] untersucht.

Kristalline Anisotropieenergie

Die Magnetisierung kann eine Abhängigkeit bezüglich der strukturellen Achsen des Materials aufweisen. Die hiermit verknüpfte Anisotropieenergie kann sowohl von

der Anisotropie der Kristallstruktur abhängen, als auch von Gitterdefekten. Im folgenden wird die kristalline Anisotropieenergie von kubischen, uniaxialen und orthorhombischen Kristallen vorgestellt. Die Herleitung der Gleichung erfolgt in der Regel durch die Berücksichtigung der ersten zwei harmonischen Ausdrücke der Beschreibung der Sphäre eines Spins [AUB76], [GER78]. Die Beiträge höherer Ordnung können aufgrund der thermischen Agitation vernachlässigt werden. Allgemein läßt sich die Energie als Anisotropiefunktional ausdrücken:

$$E_{an} = J_s \int F_{an}(\mathbf{m}) dV \quad (2.5)$$

Die reduzierte Anisotropieenergie kubischer Werkstoffe läßt sich beschreiben durch Gl. 2.6. Die Komponenten m_i der Magnetisierung entsprechen der Richtungskomponente entlang der kubischen Achsen. Die Materialkonstanten sind K_{c1} und K_{c2} . Das Vorzeichen von K_{c1} bestimmt, welche Raumrichtungen, $\langle 100 \rangle$ oder $\langle 111 \rangle$, die leichte Achse einnimmt.

$$e_{Kc} = K_{c1}(m_1^2 m_2^2 + m_1^2 m_3^2 + m_2^2 m_3^2) + K_{c2} m_1^2 m_2^2 m_3^2 \quad (2.6)$$

$$e_{Ku} = K_{u1} \sin^2 \theta + K_{u2} \sin^4 \theta \quad (2.7)$$

Bei hexagonalen und tetragonalen Kristallen zeigt sich eine uniaxiale Anisotropie, die energetisch die Form der Gl. 2.7 besitzt. Der Winkel θ liegt zwischen der Magnetisierungsrichtung und der Anisotropieachse. Große positive Werte für K_{u1} beschreiben eine „leichte“ Achse (axiale Anisotropie), wohingegen ein großes, negatives K_{u1} eine „leichte“ Fläche (planare Anisotropie) senkrecht zur Anisotropieachse definiert. Für einige Paarungen aus K_{u1} und K_{u2} lassen sich auch konische Anisotropien erzeugen. Für die Anisotropie von Strukturen mit geringeren Symmetrien, als die in tetragonalen oder hexagonalen Strukturen, oder für überlagerte uniaxiale Anisotropien, wird der Ausdruck *orthorhombische Anisotropie* verwendet. Die entsprechende Energiedichte beträgt:

$$e_{Ko} = \sum_{i,k} K_{i,k} m_i m_k \quad (2.8)$$

$K_{i,k}$ ist ein symmetrischer Tensor. Eine systematische Beschreibung der magnetokristallinen Anisotropie gibt [DAR74].

Zeeman Energie

Die Energie, hervorgerufen durch ein externes, magnetisches Feld \mathbf{H}_{ex} , wird als Zeeman Energie E_H bezeichnet [DÖR66], [AHA96], [BRO62]. Sie ist direkt der Magnetisierung zugeordnet und läßt sich ausdrücken durch:

$$E_H = -J_s \int \mathbf{H}_{\text{ex}} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{r}) dV \quad (2.9)$$

Streifeldenergie

Die Streifeldenergie E_d , auch Demagnetisierungsenergie genannt, wird direkt aus einem von der Magnetisierung gewonnenen Streifeld der folgenden Form hergeleitet [HUB98a]:

$$E_d = -\frac{1}{2} \int \mathbf{H}_d \mathbf{J}(\mathbf{r}) dV . \quad (2.10)$$

Dieses als \mathbf{H}_d bezeichnete Streifeld resultiert aus der Divergenz der Polarisation $\mathbf{J}(\mathbf{r})$. Durch Einführung von magnetischen Ladungsdichten im Volumen λ_V und an der Oberfläche σ_S läßt sich \mathbf{H}_d entwickeln:

$$\lambda_V = -\text{div } \mathbf{m} , \quad \sigma_S = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} . \quad (2.11)$$

Die Größe \mathbf{n} ist ein senkrecht zur Oberfläche stehender Einheitsvektor. Mit dieser Definition kann ein magnetisches Potential Φ_d des Streifeldes an der Stelle \mathbf{r} durch Integration über \mathbf{r}' hergeleitet werden:

$$\Phi_d = \frac{J_s}{4\pi\mu_0} \left[\int \frac{\lambda_V(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dV + \int \frac{\sigma_S(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} dS \right] \quad (2.12)$$

Das Streifeld läßt sich nun direkt aus dem magnetischen Potential gewinnen durch:

$$\mathbf{H}_d(\mathbf{r}) = -\text{grad } \Phi_d(\mathbf{r}) . \quad (2.13)$$

Eine weitere Integration ermöglicht die Herleitung der Energie direkt aus der Ladungsdichte und dem magnetischen Potential:

$$E_d = J_s \left[\int \lambda_V(\mathbf{r}) \Phi_d(\mathbf{r}) dV + \int \sigma_S(\mathbf{r}) \Phi_d(\mathbf{r}) dS \right] \quad (2.14)$$

Oberflächenstrefelder werden häufig auch als *Formanisotropie* bezeichnet, da sie eine von der Geometrie beeinflusste Anisotropie darstellen.

2.1.2 Statische, mikromagnetische Differentialgleichung

Die Summe der Energien aus Kapitel 2.1.1 führt zur Gesamtenergie des Systems:

$$E_{ges} = J_s \int \left[A(\mathbf{grad} \mathbf{m})^2 + F_{an}(\mathbf{m}) - \mathbf{H}_{ex} \cdot \mathbf{J} - \frac{1}{2} \mathbf{H}_d \mathbf{J} \right] dV \quad (2.15)$$

Die Magnetostriktion und Magnetoelastizität wird hierbei vernachlässigt. Die Magnetisierung muß zusätzlich die Bedingung Gl. 2.2, und die Streufeldenergie muß die Maxwell'schen Gleichungen Gl. 2.16 und Gl. 2.17 erfüllen.

$$\text{div}(\mu_0 \mathbf{H}_d + \mathbf{J}) = 0 \quad (2.16)$$

$$\text{rot} \mathbf{H}_d = 0 \quad (2.17)$$

Ein Variationsansatz führt nun zu einem gekoppelten Gleichungssystem bestehend aus Gl. 2.16, Gl. 2.17 und der folgenden:

$$-2A\Delta \mathbf{m} + \mathbf{grad}_m F_{an}(\mathbf{m}) - (\mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}_d) J_s = f_L \mathbf{m} \quad (2.18)$$

Die Operation Δ ist der Laplace Operator $\Delta = \text{div} \cdot \text{grad}$ und f_L ist der „Lagrangian“ Parameter. Dieses Gleichungssystem wird als die *Brown'schen Gleichungen* bezeichnet. Es handelt sich hierbei um eine rein statische Betrachtung der Magnetisierungsverteilung [BRO63a], [DÖR66], [ASS86], [HUB98a].

2.1.3 Effektives, magnetisches Feld

Die linke Seite der Gleichung Gl. 2.18 ist äquivalent zu $-J_s \mathbf{H}_{eff}$ durch die Einführung des effektiven, magnetischen Feldes \mathbf{H}_{eff} :

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_{ex} + \mathbf{H}_d + \frac{1}{J_s} [2A\Delta \mathbf{m} - \mathbf{grad}_m F_{an}(\mathbf{m})] \quad (2.19)$$

Dieses effektive, magnetische Feld bietet eine anschauliche Form der mikromagnetischen Gleichung. Das aus der Polarisation und dem effektiven Feld erzeugte magnetische Moment

$$\mathbf{T} = \mathbf{J} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}, \quad (2.20)$$

zwingt die Magnetisierung in eine stabile Lage. Hierbei wird das Moment minimiert und die Gesamtenergie nimmt einen stabilen Zustand ein. [HUB98a]

2.1.4 Randbedingungen

Der Variationsansatz führt zu den folgenden Randbedingungen an der Oberfläche und den möglichen Grenzflächen des Systems:

$$\mathbf{m} \times [2A(\mathbf{n} \cdot \mathbf{grad})\mathbf{m} + \mathbf{grad}_m e_s(\mathbf{m}, \mathbf{n}) - (C_{bl} + 2C_{bq}\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}')\mathbf{m}'] = 0 \quad (2.21)$$

Die Magnetisierung an den Grenzflächen eines benachbarten Mediums ist \mathbf{m}' . Die Größe e_s beschreibt die Oberflächenanisotropie durch die Kopplung zu dem benachbarten Medium. Für den Fall, daß e_s vernachlässigt werden kann und es keine Grenzflächen innerhalb des Systems gibt, läßt sich Gl. 2.21 vereinfacht darstellen durch:

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{grad})\mathbf{m} = 0. \quad (2.22)$$

Dies bedeutet, daß die Ableitung der Magnetisierung in Richtung der Oberflächennormalen an der Oberfläche verschwindet. Eine detailliertere Beschreibung der Randbedingungen läßt sich in [DÖR66], [HOF70], [HUB98a], [LAB95] finden.

2.1.5 Dynamische, mikromagnetische Differentialgleichung

Die in Kapitel 2.1.2 beschriebene Differentialgleichung beschränkt sich auf eine statische Betrachtungsweise der mikromagnetischen Theorie. Eine Erweiterung auf dynamische Fälle ist möglich. Ein Winkelmoment, welches auf das magnetische Moment \mathbf{T} wirkt, führt zu einer gyrotropischen Reaktion, welche durch folgenden Ausdruck beschrieben werden kann [LAN35]:

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = -\gamma \mathbf{J} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} \quad (2.23)$$

γ ist der gyromagnetische Faktor, eine Konstante festgelegt durch $\gamma = g \cdot 1.105 \cdot 10^5 \text{ m/As}$. Der *Lande* Faktor g liegt für ferromagnetische Materialien bei ca. $g = 2$. *Landau*, *Lifshitz* und *Gilbert* entwickelten unter Verwendung dieser gyromagnetischen Effekte eine Differentialgleichung, genannt *Landau-Lifshitz-Gilbert* Gleichung, in der folgenden reduzierten Form [LAN35], [BRO63a], [HUB98a]:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \beta(\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}}]) + \gamma(\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}}) \quad (2.24)$$

Der dimensionslose, empirische Dämpfungsfaktor β beschreibt die Phänomene der Dissipation. Bei geringen Frequenzen überwiegt der Dämpfungsterm, d.h. der linke Summand der Gl. 2.24. Der gyromagnetische Term, also der rechte Summand, muß erst bei Frequenzen im GHz-Bereich berücksichtigt werden.

2.2 Numerische Beschreibung des Mikromagnetismus

Bei der Differentialgleichung (Gl. 2.16-Gl. 2.18) handelt es sich um ein nichtlineares, nichtlokales, gekoppeltes Gleichungssystem, dessen analytische Lösung nur bei Fällen, die eine starke Vereinfachung zulassen, möglich ist. Um dennoch komplexe Probleme untersuchen zu können, bedarf es einer numerischen Beschreibung der Differentialgleichung. Durch rechnergestützte Simulationen können dann mikromagnetische Probleme gelöst werden. Die Besonderheit der Differentialgleichung, geprägt von dem Zusammenspiel starker Nichtlinearität, Nichtlokalität und Kopplung, erschwert die numerische Lösung der mikromagnetischen Theorie erheblich. So existieren bislang eine Vielzahl von mikromagnetischen, simulationsgestützten Untersuchungen, deren Ergebnisse jedoch überwiegend unbefriedigend sind [AHA98b]. Außerdem beschränken sich die Rechnungen bislang noch auf kleine Probleme, wie z.B. die Untersuchung von Nanopartikeln und kleinen sehr dünnen Schichten. Bei der numerischen Beschreibung des Mikromagnetismus gibt es unterschiedliche Vorgehensweisen. Einen besonderen Stellenwert wird der Berechnung des Streufeldes beigemessen. Dieser Anteil nimmt ca. 80% der Rechenzeit und des Speicherbedarfes einer Simulation ein und ist somit von besonderer Bedeutung.

2.2.1 Finite-Elemente Diskretisierung

Die Implementierung eines Finite-Elemente Algorithmus bedeutet eine Diskreti-

sierung des Gebietes durch ein Netz mit geeigneten Stützstellen und der Interpolation innerhalb der Elemente. Das hierbei gewonnene Gleichungssystem muß die Differentialgleichung (Gl. 2.16-Gl. 2.18) und die Randbedingung Gl. 2.22 erfüllen. Die Wahl der Interpolationsfunktion ist abhängig von der entsprechenden diskretisierten Energie. Für die Anisotropie- und Zeeman Energie wird eine einfache lineare Interpolation verwendet. Die Austauschkopplungs- und die Streufeldenergie hingegen werden durch Polynome interpoliert. Das Netz besteht ausschließlich aus einem regelmäßigen Gitter. Für den zweidimensionalen Fall bedeutet dies die Verwendung von rechteckigen und für den dreidimensionalen Fall die Verwendung von quaderförmigen Elementen. Die Gesamtenergie Gl. 2.15 kann für den zweidimensionalen Fall diskretisiert umformuliert werden zu [RAM97]:

$$\begin{aligned} \hat{e} = & \sum_{i,j,p,q,k,r} \left\{ m_k^{ij} \cdot \hat{E}_{Akr}^{j pq} \cdot m_r^{pq} + m_k^{ij} \cdot \hat{E}_{Kkr}^{j pq} \cdot m_r^{pq} \right\} + \\ & + \sum_{i,j,p,q,k,r} \left\{ m_k^{ij} \cdot \hat{E}_{Dkr}^{j pq} \cdot m_r^{pq} \right\} - \sum_{i,j,k} \left\{ h_{exk}^{ij} \cdot m_k^{ij} \right\} \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$i, p = 0 \dots N; j, q = 0 \dots M; k, r \in \{x, y, z\}$$

Die Interpolationsmechanismen für die Zeeman Energie, die Anisotropieenergie und die Austauschkopplungsenergie [RAM97] sind konventionell und werden hier nicht weiter erläutert. Die Streufeldenergie bedarf einer intensiven Beschreibung und wird im folgenden detailliert vorgestellt.

2.2.2 Streufeldenergie

Die Berechnung der Streufeldenergie nimmt den mit Abstand zeitintensivsten Teil bei der Finiten-Elemente Berechnung ein. Die Ursache hierfür ist das sechsfache Integral Gl. 2.10-Gl. 2.12, als Folge der nichtlokalen Eigenschaft der Energie. Diese Faltung in den drei Raumrichtungen läßt sich durch eine Multiplikation im Frequenzraum ersetzen, falls die Bedingungen für eine Fourier-Transformation erfüllt sind. Da das Faltungstheorem eine entscheidende Rolle in der Optimierung der Berechnung der Streufeldenergie spielt, ist es notwendig sowohl dieses, als auch die in diesem Zusammenhang erforderliche Fast-Fourier-Transformation (FFT) näher zu erläutern [PRE92].

Fourier-Transformation

Die Fourier-Transformation zerlegt eine periodische Funktion in sinusförmige Anteile mit unterschiedlicher Frequenz und Amplitude [BRI88]. Die Fourier-Transformation einer Ortsfunktion $f(x)$ in die Frequenzfunktion $F(s)$ ist definiert als:

$$F(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i 2\pi x s} dx \quad (2.26)$$

Entsprechend läßt sich auch eine Rücktransformation finden:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(s) e^{-i 2\pi x s} ds \quad (2.27)$$

Fast-Fourier-Transformation (FFT)

Im allgemeinen liegen die Funktionen als Daten in diskreter Form vor. Es können z.B. Versuchsdaten sein, die in bestimmten Zeitabständen gemessen werden. Im Falle der Streufeldberechnung sind es die Daten an den Knoten des regelmäßigen Finite-Elemente Gitters. Die dazugehörige diskrete Fourier Transformation (DFT) lautet:

$$F_n = \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{i 2\pi k \frac{n}{N}} \quad (2.28)$$

Mit dem Algorithmus der Fast-Fourier-Transformation erreicht man eine Reduzierung der notwendigen Operationen zur Berechnung einer Faltung von N^2 auf $N \log_2 N$, wobei N die Anzahl der Unbekannten für zweidimensionale Probleme der Größe $N \times N$ darstellt.

Faltungstheorem

Die Faltung zweier Funktionen läßt sich wie folgt definieren:

$$f(x) \otimes h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') h(x - x') dx' \quad (2.29)$$

Im Frequenzbereich ist die Faltung der beiden Funktionen $f(x)$ und $h(x)$ gleich einer Multiplikation ihrer Fouriertransformierten, d.h.:

$$f(x) \otimes h(x) \Leftrightarrow F(s)H(s) . \quad (2.30)$$

Bild 2.1 zeigt zwei Funktionen und die entsprechende Faltung.

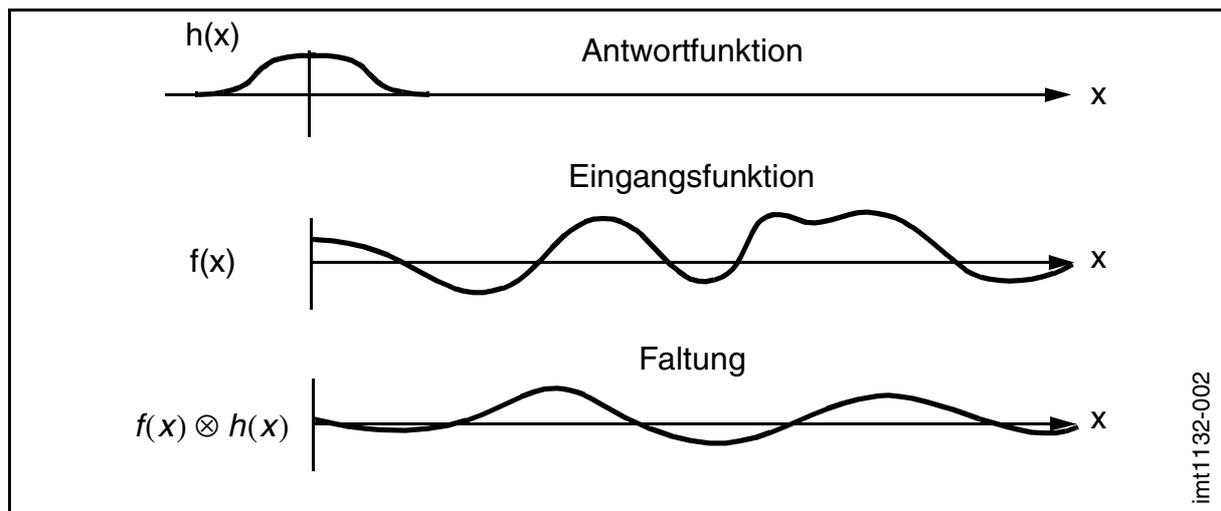


Bild 2.1: Faltung von zwei Funktionen

Betrachtet man das magnetische Potential (Gl. 2.12), so erkennt man, daß dieses einer Faltung der Form Gl. 2.29 entspricht. Hierbei ist $f(x)$ die Ladungsverteilung und $h(x)$ die Wichtungsfunktion W , der Kehrwert des absoluten Abstandes. Das diskrete Faltungstheorem setzt allerdings zwei Bedingungen voraus. Zum einen muß die Länge der Antwortfunktion gleich der Periode der Eingangsfunktion sein und zum anderen wird vorausgesetzt, daß das Eingangssignal periodisch ist. Die erste Bedingung ist durch Auffüllen der Antwortfunktion mit Nullen (zero-padding) bis zu der Länge der Eingangsfunktion erreichbar (Bild 2.2). Die Periodizität des Eingangssignals wird durch ein sogenanntes „wrap-around“ ermöglicht, d.h. durch die Verschiebung des negativen Anteils der Antwortfunktion an das Ende der Periode. Die durch eine solche Operation entstandene Faltungsfunktion wird bei der Berechnung durch eine FFT Signalverfälschungen enthalten (Bild 2.2). Um diese zu unterdrücken, fügt man wiederum Nullen an das Ende der Eingangsfunktion hinzu (zero-padding). Dabei ist jedoch zu beachten, daß die Antwortfunktion ebenso mit Nullen aufgefüllt werden muß, um die Länge der beiden Funktionen gleich zu halten. Der durch das „zero-padding“ hinzugefügte Teil wird bei der FFT unbrauchbar (Bild 2.3).

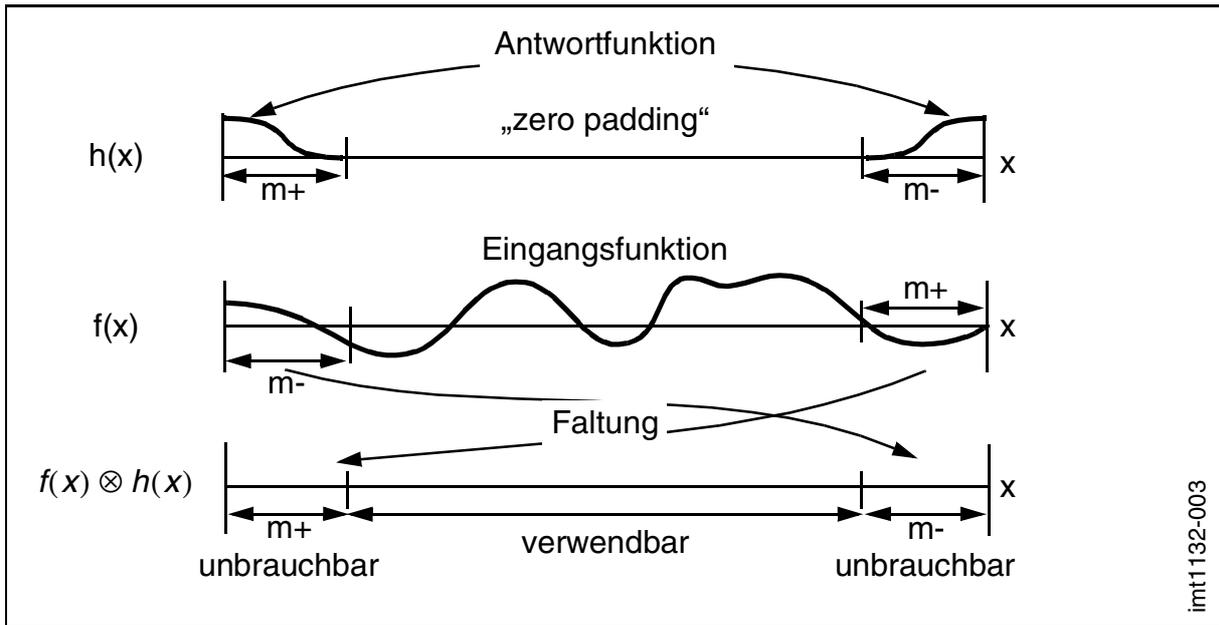


Bild 2.2: „Zero-padding“ und „wrap-around“ bei der Faltung einer nichtperiodischen Signalfunktion

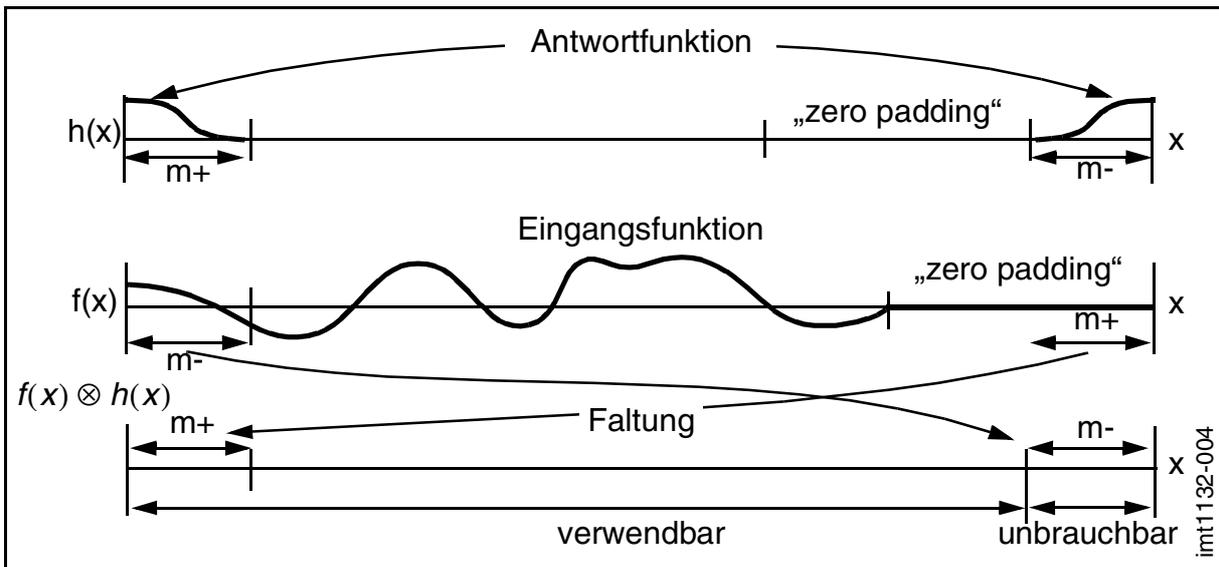


Bild 2.3: „Zero-padding“, um bei der Faltung eine Verfälschung zu vermeiden

Ein weiteres wichtiges Gesetz ist das „Parsevalsche“ Theorem [BRI88]. Dieses sagt aus, daß das Produkt zweier Funktionen im Zeitbereich gleich ihrem Produkt im Frequenzbereich ist:

$$h(x) \cdot g(x) = H(s) \cdot G(s) \tag{2.31}$$

Für den Fall, daß während der numerischen Iteration nicht das effektive Feld, sondern lediglich die Streufeldenergie von Interesse ist, kann dieses Theorem angewendet werden. Hierbei wird eine Rücktransformation in den Ortsraum gespart. Diese Verfahren, unter Verwendung der FFT, reduzieren den Rechenaufwand bei der Berechnung der Streufeldenergie erheblich und sind somit fester Bestandteil der Simulation. Durch die Verwendung rechteckiger, regelmäßiger Gitter, wird eine sehr hohe Anzahl von Elementen benötigt. Dies führt zu einer Erhöhung des Rechenaufwandes. Die Verwendung der FFT gleicht diesen Nachteil jedoch wieder deutlich aus. [MAN88], [FAB96], [RAM97]

2.2.3 Verfahren zur Minimierung der Energie

Der Variationsansatz Gl. 2.18 sieht eine Minimierung der Energie vor. Hierzu gibt es eine Reihe von unterschiedlichen Verfahren. Im folgenden werden die Methode der konjugierten Gradienten (CG, conjugate gradient) und das Verfahren der angepaßten Relaxation, auch MS DR (Modified Steepest Descent and Relaxation) genannt, kurz beschrieben. Voraussetzung beider Verfahren ist die Differenzierbarkeit der Differentialgleichung und das Vorhandensein ihres Gradienten.

Konjugierte Gradienten-Methode

Das Verfahren der konjugierten Gradienten ist eine iterative Methode zur Lösung eines sparsen, linearen Gleichungssystems. Eine Einschränkung dieser Methode ist die Verwendung sparser Matrizen. Dies bedeutet, daß die Zahl der Nullen in den Matrizen groß ist im Vergleich zu der Zahl der belegten Plätze. Die nichtlokale Eigenschaft der Streufeldenergie führt aber gerade zu einer starken Besetzung der Matrizen. Dies reduziert somit die Effizienz der CG-Methode erheblich. Die Anwendung auf nicht-lineare Gleichungssysteme ist möglich, wenn sich diese bei jedem Iterationsschritt linearisieren lassen. Allerdings läßt das Verfahren keine Randbedingung, wie die der Einheitsmagnetisierung Gl. 2.2, zu. Aus diesem Grund muß eine Polarkoordinatendarstellung verwendet werden. Bei dieser Koordinatentransformation ist die Bedingung Gl. 2.2 überflüssig. Eine genaue Beschreibung liefert [SHE94]. Die Anwendung dieser Methode auf das mikromagnetische Gleichungssystem ist in [RAM97] detailliert beschrieben.

Angepaßte Relaxation

Das Verfahren der angepaßten Relaxation, bzw. MS DR Verfahren (Modified Steepest Descent and Relaxation), ist ein an der Universität Erlangen entwickelter Gleichungslöser ([RAM97]), welcher speziell an die Bedürfnisse der numerischen, mikromagnetischen Theorie angepaßt ist. Dieser Minimierer eignet sich aber auch für andere stark nichtlineare Funktionen vieler Variablen. Der Ansatz basiert auf der *Landau-Lifshitz-Gilbert* Gleichung (Gl. 2.24). Diese stützt sich auf die Variationsgleichung Gl. 2.18 und beschreibt, daß ausgehend von dem effektiven Feld ein Drehmoment auf die Magnetisierung ausgeübt wird. Im Gleichgewichtszustand verschwindet dieses Moment. Die dynamischen Beiträge sind festgelegt durch den gyromagnetischen Effekt und einem Dämpfungsterm. Für den Fall, daß die Simulationen eine Lösung statischer Probleme verfolgen, kann der gyromagnetische Effekt vernachlässigt werden. So läßt sich die *Landau-Lifshitz-Gilbert* Gleichung verkürzt darstellen durch:

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \beta(\mathbf{m} \times [\mathbf{m} \times \mathbf{h}_{\text{eff}}]) \quad (2.32)$$

Diese Gleichung kann zur Grundlage eines Iterationsalgorithmus werden, indem sie umformuliert wird zu:

$$\mathbf{m}_{\text{neu}} = \mathbf{m}_{\text{alt}} - \beta(\mathbf{m}_{\text{alt}} \times [\mathbf{m}_{\text{alt}} \times \mathbf{h}_{\text{alt}}]) \quad (2.33)$$

Die Anpassung der Iteration erfolgt durch die Variation des Dämpfungsparameters β . Wird nun bei jeder Iteration β so angepaßt, daß sich schnellstmöglich die Energie minimiert, erhält man das MS DR Verfahren. Es zeigt, verglichen mit der konjugierten Gradienten Methode, eine deutliche Reduzierung der Rechenzeit und des Speicherbedarfes um ein Vielfaches [RAM97].

2.3 Domänenwände

Die Untersuchung von mikromagnetischen Systemen benötigt einen Einblick in die Domänentheorie. Hierbei spielen die Domänenwände die wichtigste Rolle. Domänen, auch *Weißsche Bezirke* genannt, sind Bereiche gleicher Magnetisierungsrichtung. Der Übergangsbereich zwischen zwei Domänen nennt man Domänenwand.

In dieser geht die Magnetisierungsrichtung einer Domäne in die der Nachbardomäne über. Die meßtechnische Untersuchung von Domänen und ihren Wänden ist begrenzt durch die Tatsache, daß nur die Oberfläche betrachtet werden kann. Bei Dünnschichtstrukturen ist dies unerheblich, da sich die Magnetisierungsanordnungen innerhalb der Schichtdicke kaum ändern. Bei dicken Schichten oder Teilchen hingegen läßt sich aus diesem Grund keine Aussage über die Domänenstruktur im Inneren des Systems treffen. Die Domänenwände unterscheiden sich primär durch den Raum den sie einnehmen, wie sie den Unterschied in der Magnetisierungsrichtung zweier benachbarter Domänen ausgleichen und wie groß dieser Winkelunterschied tatsächlich ist. Die klassischen Domänenwände sind die Bloch-, Neel- und Stachelwand. Sie sollen hier näher beschrieben werden. Unterschieden werden hier ferner die Winkelunterschiede benachbarter Domänen durch 180° und 90° Wände, also Übergänge von gegensätzlich magnetisierten Nachbardomänen und im rechten Winkel zueinander stehenden.

2.3.1 Blochwand

Diese Wandform, benannt nach *Felix Bloch* [BLO32], zeichnet sich dadurch aus, daß in ihr die Magnetisierung aus der Ebene heraus rotiert. Bei dünnen Schichten führt dies zu stark ausgeprägten Ladungen an den Oberflächen und somit zu hohen Streufeldern. Bild 2.4 zeigt eine symmetrische Blochwand in einer dünnen Schicht.

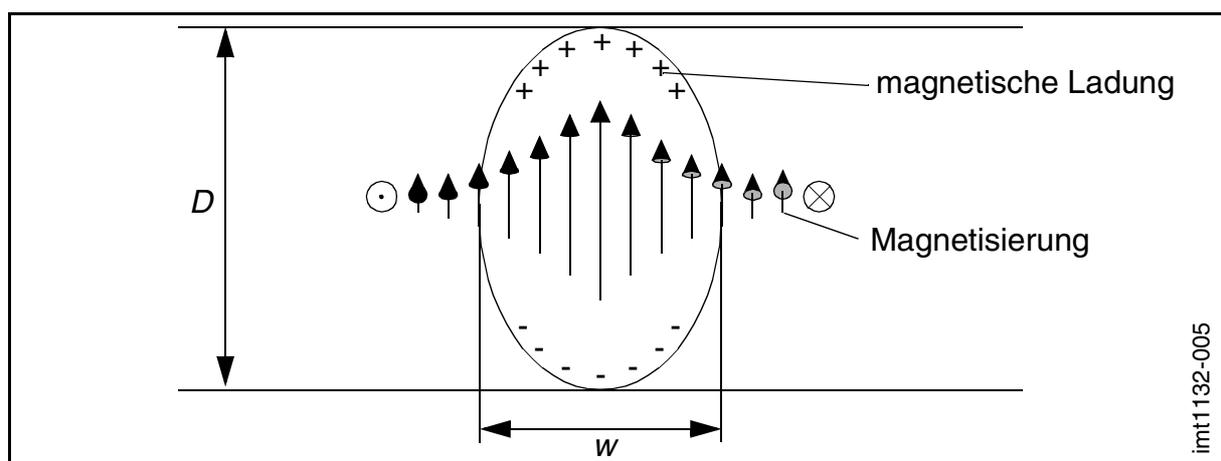


Bild 2.4: Symmetrische Blochwand in einer dünnen Schicht

Diese Symmetrie der Magnetisierungsverteilung kann für bestimmte Geometrie- und Materialparameter gebrochen werden. Es entstehen dann asymmetrische Bloch-

wände. Sie zeichnen sich dadurch aus, daß direkt an der Oberfläche die Magnetisierungsrichtung nicht senkrecht zur Oberfläche steht, sondern eine leichte Neigung aufweist (Bild 2.5).

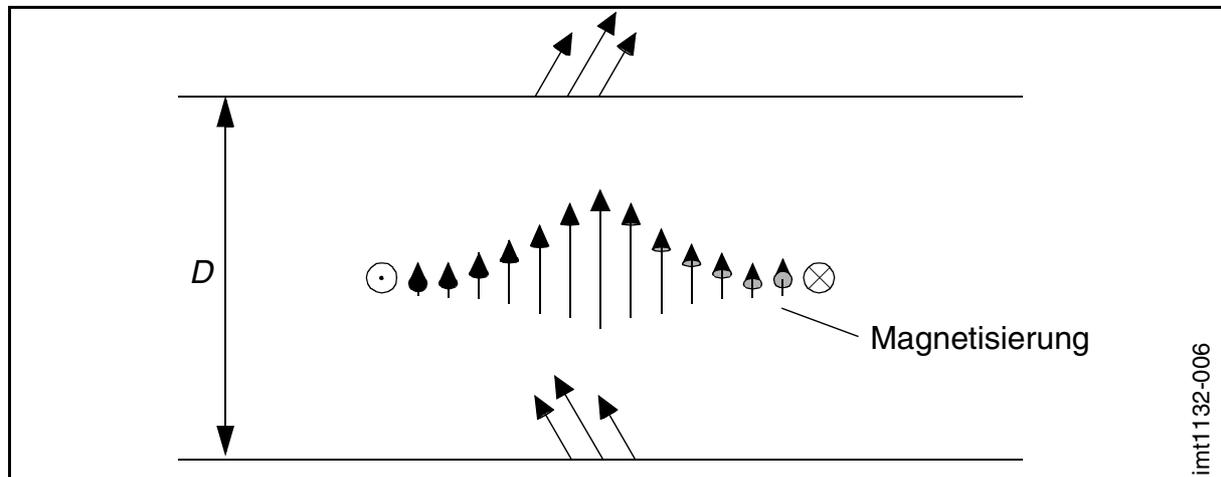


Bild 2.5: Asymmetrische Blochwand in einer dünnen Schicht

Ist die Dicke der Schicht D ausreichend groß, so sind diese Oberflächenstreuungsfelder im Vergleich zu den Volumenstreuungsfeldern gering. Dies ist der Fall bei dicken Schichten oder Teilchen, wie in Bild 2.6 dargestellt.

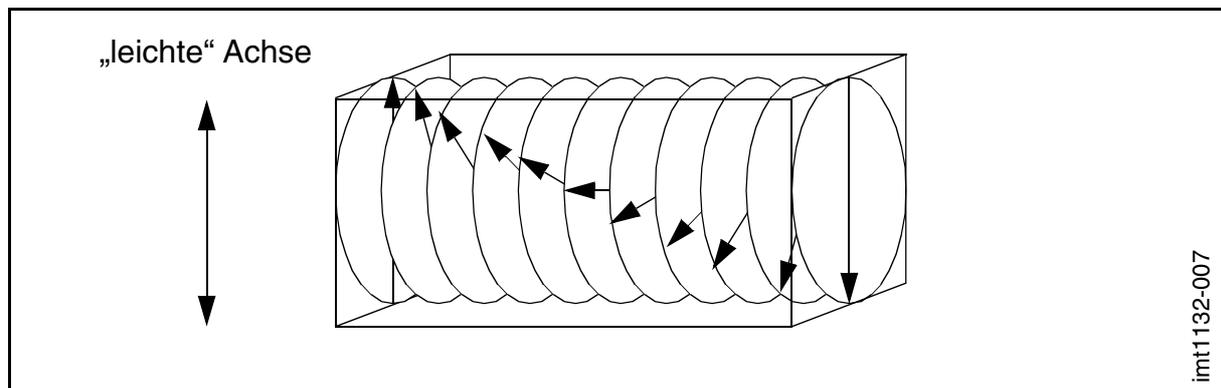


Bild 2.6: Blochwand in dicken Schichten und Teilchen

Bei geringen Schichtdicken wird die Blochwand aus energetischen Gründen von der Neelwand abgelöst, um die Oberflächenstreuungsfelder zu verringern.

2.3.2 Neelwand

Die Reduktion der magnetischen Ladungen auf der Oberfläche von dünnen Schichten durch eine Rotation der Magnetisierung in der Schichtebene weist die Neel-

wand aus. Eine symmetrische Neelwand in einer dünnen Schicht ist in [Bild 2.7](#) dargestellt. Diese Form besitzt geringere Oberflächenstrefelder auf Kosten des Volumenstrefeldes. Bei sehr dünnen Schichten ist dies energetisch von Vorteil.

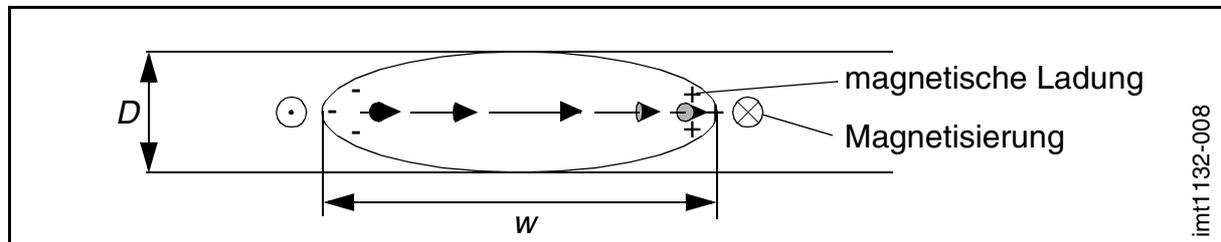


Bild 2.7: Symmetrische Neelwand in einer dünnen Schicht

Wie bei der Blochwand existieren auch bei der Neelwand asymmetrische Formen. In diesem Fall liegen die Magnetisierungen in der Mitte der Wand nicht parallel zur Oberfläche, sondern weisen eine geringe Neigung auf ([Bild 2.8](#)).

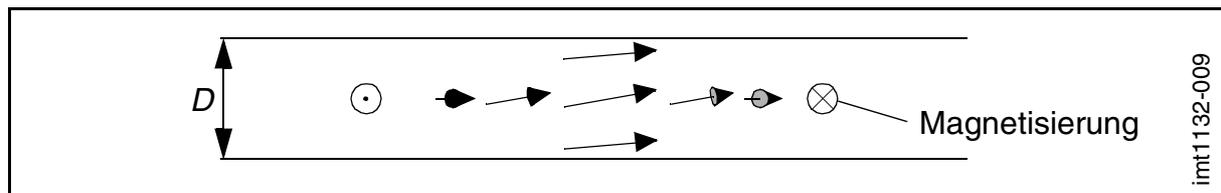


Bild 2.8: Asymmetrische Neelwand in einer dünnen Schicht

2.3.3 Stachelwand (Crosstie)

Für Schichtdicken, bei denen die reduzierten Oberflächenstrefelder bei der Neelwand vergleichbar sind mit den geringen Volumenstrefeldern der Blochwand, können Wände auftreten, bei denen die Magnetisierungen stachelförmig aus der Schichtoberfläche weisen, wohingegen der überwiegende Teil der Magnetisierung parallel zur Oberfläche liegt ([Bild 2.9](#)). Die Position der Stachel hängt stark von der Geometrie und der Homogenität des Materials ab.

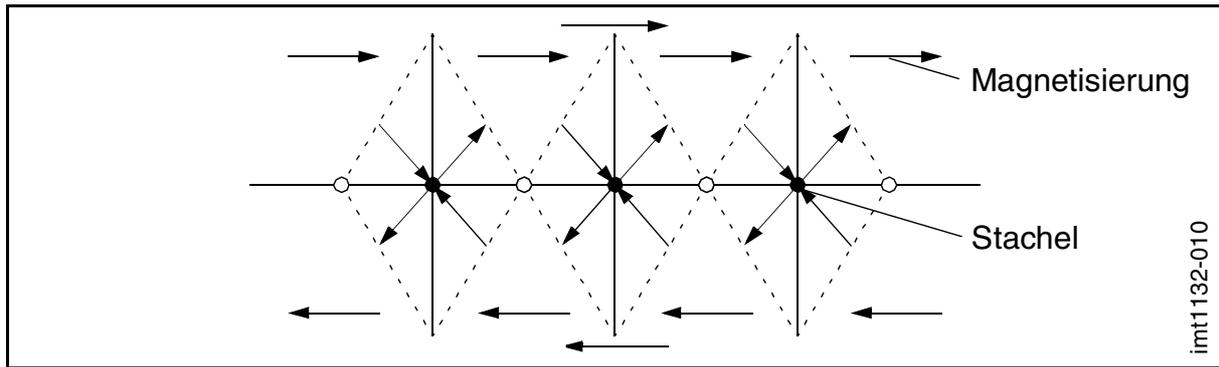


Bild 2.9: Domänenmodell einer Stachelwand (Crosstie)

Für praktische Anwendungen ist diese Form von Wand unerwünscht, da die Stachel, durch die schwache Stabilität der Lage der Wirbel, zu Bewegungen neigen und somit ein Rauschen verursachen können.

2.3.4 Ausgleich von Winkelunterschieden

Wie bereits erwähnt, ist ein weiteres Merkmal einer Domänenwand, welchen Winkelunterschied sie zwischen benachbarten Domänen auszugleichen hat. Dabei sind die zwei am häufigsten vorkommenden Winkelunterschiede 180° und 90° .

2.3.4 a 180 Grad Wände

Die einfachste Form der Domänenwand bezüglich des Winkelunterschieds ist die 180° Wand, dargestellt in Bild 2.10. Sie tritt in unendlichen, uniaxialen Systemen auf, in denen die Magnetostriktion vernachlässigbar ist. Diese 180° Wand teilt zwei Domänen mit antiparalleler Magnetisierungsrichtung. Für den Fall, daß die Anisotropieachse in der Ebene der Wand liegt und die Magnetisierungen parallel zur Ebene rotieren, entstehen keine magnetischen Ladungen an der Wandoberfläche oder in der Wand selbst. Die Wand ist somit streufeldfrei und stellt einen bevorzugten Zustand dar. Diese Wand wurde erstmals von *Landau* und *Lifshitz* [LAN35] berechnet.

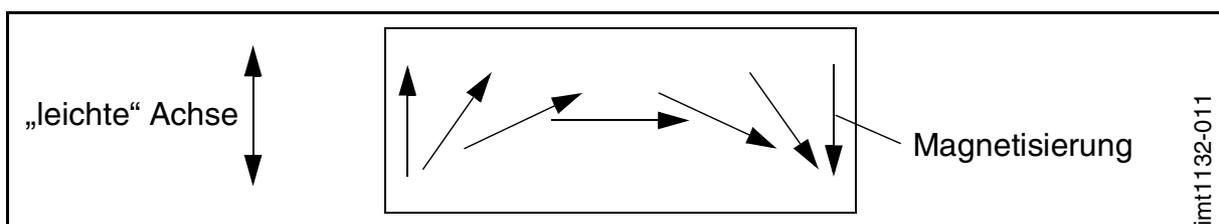


Bild 2.10: 180° Wand

2.3.4 b 90 Grad Wände

Insbesondere in Systemen mit multiaxialer Anisotropie oder in Systemen, die einem magnetischen Feld ausgesetzt sind, welches senkrecht zu einer uniaxialen Anisotropieachse liegt, können eine andere Form von Wände auftreten. Bei diesen liegt die Orientierung der Magnetisierung von einer Domäne zur nächsten unterhalb von 180° . Bevorzugt werden 90° Wände.

2.3.5 Phasendiagramm von Domänenwänden

Stellt man die energetischen Niveaus der einzelnen Wände, abhängig von der Schichtdicke D und der Materialeigenschaft $Q = K_u / K_d$ dar, so erhält man Bild 2.11. Hier ist deutlich zu sehen, daß es scharfe Grenzen zwischen den einzelnen Wandtypen gibt.

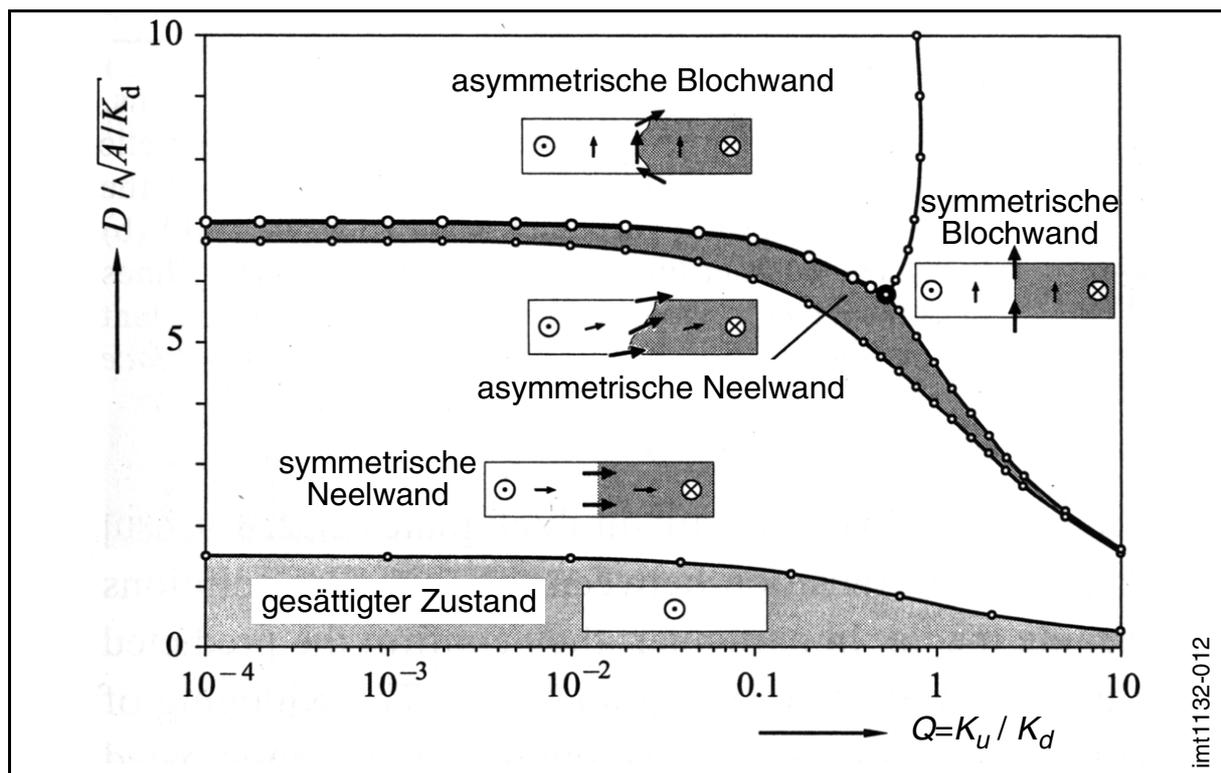


Bild 2.11: Phasendiagramm von Domänenwänden in dünnen Streifen [HUB98a]

Der zuvor genannte Zusammenhang zwischen den Wandtypen und der Schichtdicke wird in Bild 2.11 bestätigt. Mit zunehmender Dicke findet ein Übergang von der Neelwand zur Blochwand statt. Die Stachelwand wird in diesem Phasendiagramm nicht berücksichtigt, da es sich bei den gezeigten Ergebnissen um zweidimensionale

Rechnungen handelt und die Stachelwand eine dreidimensionale Analyse erfordert.

2.4 Domänen in dünnen Schichten mit geringer Anisotropie

Im folgenden werden Domänen in dünnen Schichten beschrieben, welche eine geringe Anisotropie ($Q = K_u / K_d < 1$) besitzen. Diese Schichten zeichnen sich dadurch aus, daß die Dicke im Vergleich zu der Länge und Breite sehr klein ist. In diesem Fall liegt die Magnetisierungsrichtung auch ohne äußeres magnetisches Feld parallel zur Oberfläche. Dieser Zustand stellt sich unabhängig von der Orientierung der Anisotropie ein. Die im folgenden gezeigten Darstellungen der Domänen beinhalten sowohl eine Skizze der Magnetisierungskonfiguration, als auch eine sogenannte *Kerreffektaufnahme* [HUB98a]. Hierbei wird eine Probe mit linear polarisiertem Licht bestrahlt. Die Polarisations Ebene des einfallenden Lichts wird bei Reflexion an magnetischen Schichten gedreht. Durch Auswertung des Polarisationswinkels kann auf die Magnetisierungsrichtung geschlossen werden. Die Darstellungen zeigen jeweils eine Komponente der Magnetisierungen als grauschattiertes Bild.

Spreizzustand

Ein eindomäniger Zustand ist der sogenannte Spreizzustand, bei dem die Magnetisierungen größtenteils homogen ausgerichtet sind. Liegt diese Ausrichtung entlang einer der geometrischen Achsen, so führt dies zu einem Aufspreizen der Magnetisierungen an den Enden. Der Grad der Aufspreizung ist abhängig von der Stärke des anliegenden Feldes.

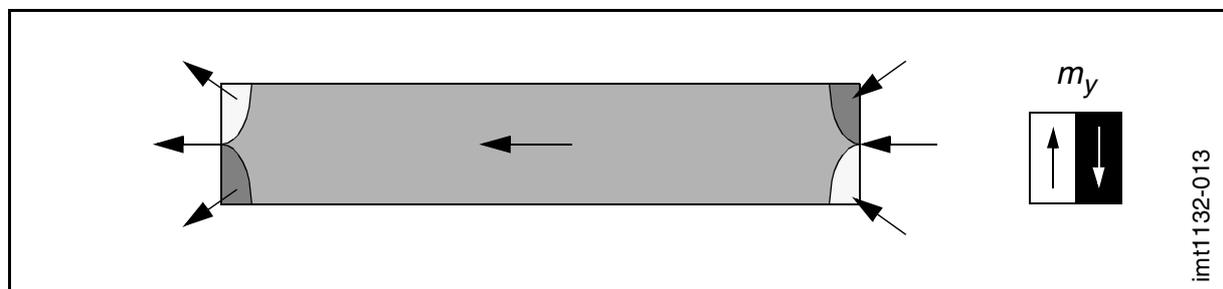


Bild 2.12: Magnetisierungsverteilung beim Spreizzustand (Skizze) [HUB98a]

C- und S-Konfiguration

Eine Abweichung vom Spreizzustand, bei dem dessen Symmetrie gebrochen

wird, stellen die C- und S- Konfigurationen dar. Diese ähneln dem Spreizzustand in der Form, daß es sich hier ebenfalls um eindomänige Zustände handelt. Die Magnetisierungsverteilungen an den Abschlußkanten führen zu einer geringeren Streufeldenergie und sind somit ohne externes Feld oftmals günstiger als der Spreizzustand.

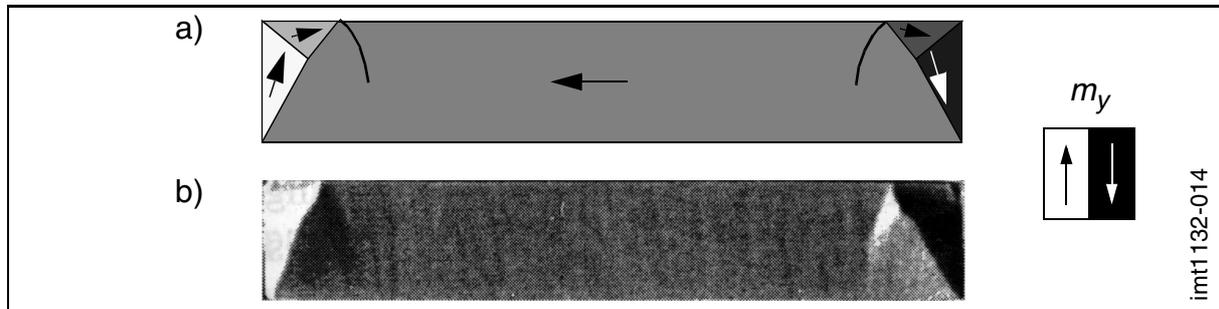


Bild 2.13: Magnetisierungsverteilung einer C-Konfiguration (a) Skizze und b) Kerr-effektaufnahme) [HUB98a]

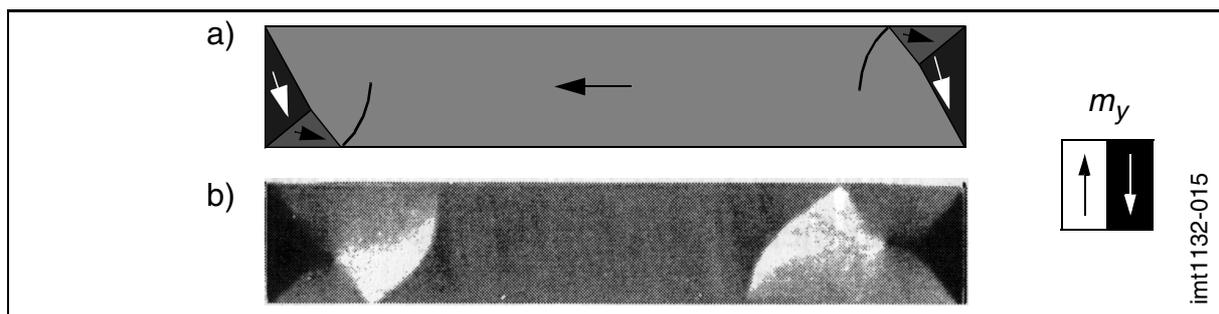


Bild 2.14: Magnetisierungsverteilung einer S-Konfiguration (a) Skizze und b) Kerr-effektaufnahme) [HUB98a]

Der Unterschied zwischen der C- und der S-Konfiguration liegt lediglich in der Orientierung der Abschlußmagnetisierungen.

Landau-Struktur

Da die Streufeldenergie oftmals einen hohen Anteil an der Gesamtenergie besitzt, versuchen die Magnetisierungen eine Konfiguration zu erreichen, bei der dieser Energieanteil möglichst gering ist. *Landau* und *Lifshitz* (LAN35) entdeckten eine Anordnung, welche den Streufluß minimiert. Diese sogenannte Landau-Struktur (**Bild 2.15**) besitzt im Gegensatz zu einer einheitlichen Magnetisierung eine geringere Streufeldenergie.

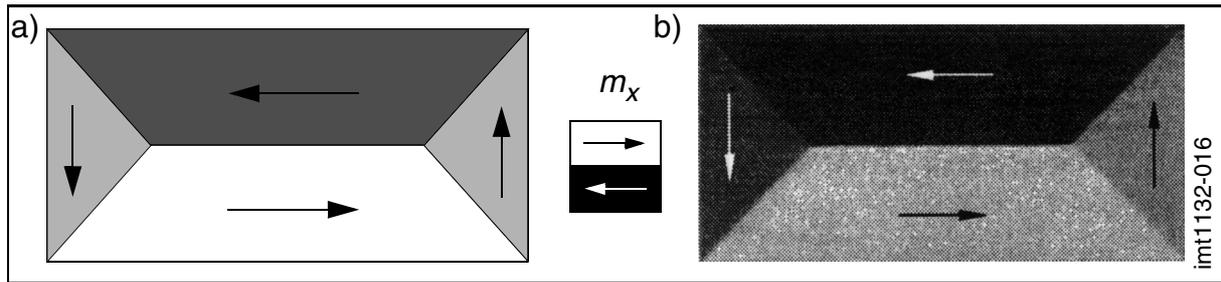


Bild 2.15: Magnetisierungsverteilung einer Landau-Struktur (a) Skizze und b) Kerr-effektaufnahme) [HUB98a]

Außerdem zeichnet sich die Struktur dadurch aus, daß die Magnetisierungen einer geschlossenen Kurve folgen und diese somit kaum aus der Oberfläche heraus weisen.

Rauten-Struktur

Das Modell von *Landau* und *Lifshitz* weist hochenergetische 180° Wände auf. Eine Struktur, die stattdessen 90° Wände ausbildet, ist die Rauten-Struktur (Bild 2.16). Eine Besonderheit der Rauten-Struktur ist, daß in dieser Struktur Wirbel auftreten, in deren Zentren die Magnetisierung senkrecht zur Ebene stehen kann.

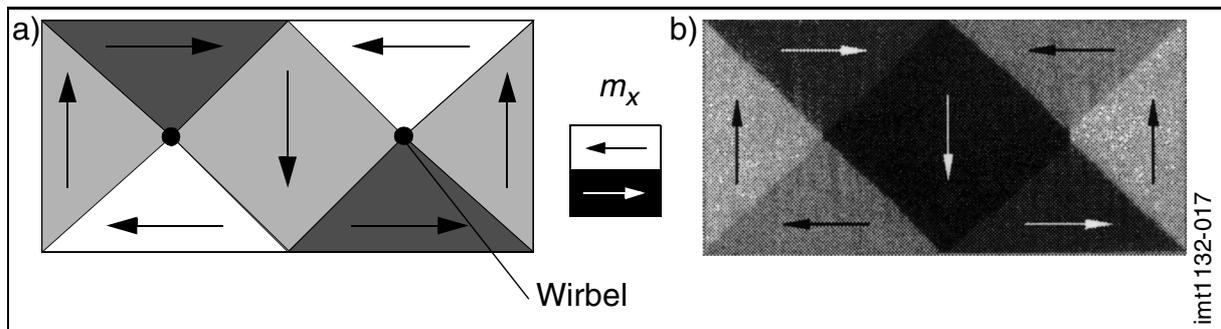


Bild 2.16: Magnetisierungsverteilung einer Rauten-Struktur (a) Skizze und b) Kerr-effektaufnahme) [HUB98a]

Stachel-Struktur

Eine weitere Struktur, welche der Rauten-Struktur ähnelt, ist die Stachel-Struktur. Bei dieser treten bei den Kreuzungspunkten der Magnetisierungen Stachel (vgl. Kapitel 2.3.3) auf. Diese Form wird bei größeren Schichtdicken bevorzugt, bei denen der Austritt der Magnetisierung aus der Oberfläche zu einem nicht zu starken Anstieg

der Streufeldenergie führt. Bei Stachel-Strukturen können eine Vielzahl von Stacheln auftreten.

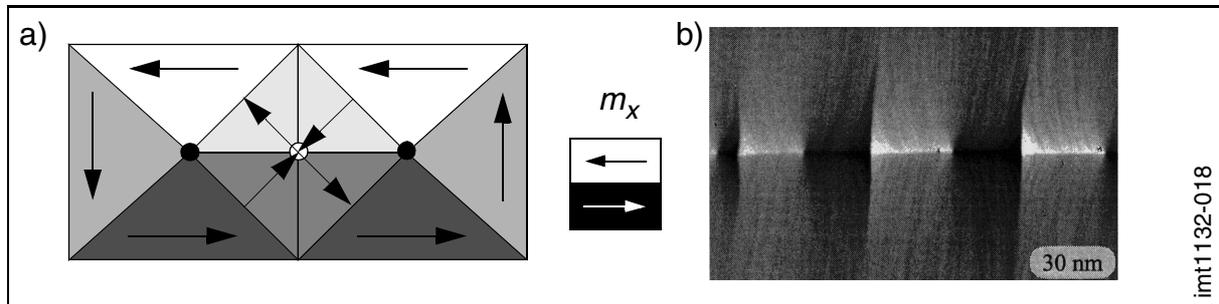


Bild 2.17: Magnetisierungsverteilung einer Stachel-Struktur (a) Skizze und b) Kerr-effektaufnahme) [HUB98a]

2.5 Schalten kleiner Teilchen

2.5.1 Stoner-Wohlfarth Modell

Das Schalten kleiner Teilchen tritt in Körpern mit einer gleichmäßigen Magnetisierungskonfiguration auf, die keine oder nur wenige Domänenwände aufweisen. Wird von einem gesättigten Zustand ausgegangen, der durch ein hohes, äußeres Feld hervorgerufen wird, kann die Reduktion dieses Feldes zu einem Schaltvorgang führen. Dieser wird gekennzeichnet durch den Übergang vom Gleichgewichtszustand der gesättigten Konfiguration in eine Gleichgewichtskonfiguration mit geringerer Energie. Eine Blockade zwischen den Gleichgewichtszuständen führt zu einer Hysterese im Verlauf der feldabhängigen, mittleren Magnetisierung. Das Schaltfeld ist definiert als das Feld, bei dem ausgehend von der gesättigten Konfiguration die Magnetisierungskonfiguration einen Instabilitätspunkt aufweist. Schaltvorgänge können unter bestimmten Randbedingungen geschlossen, analytisch berechnet werden, wie *Stoner* und *Wohlfarth* in [STO48] zeigen. An dem Beispiel des Stoner-Wohlfarth Modells lassen sich einige einfache Schaltvorgänge erklären.

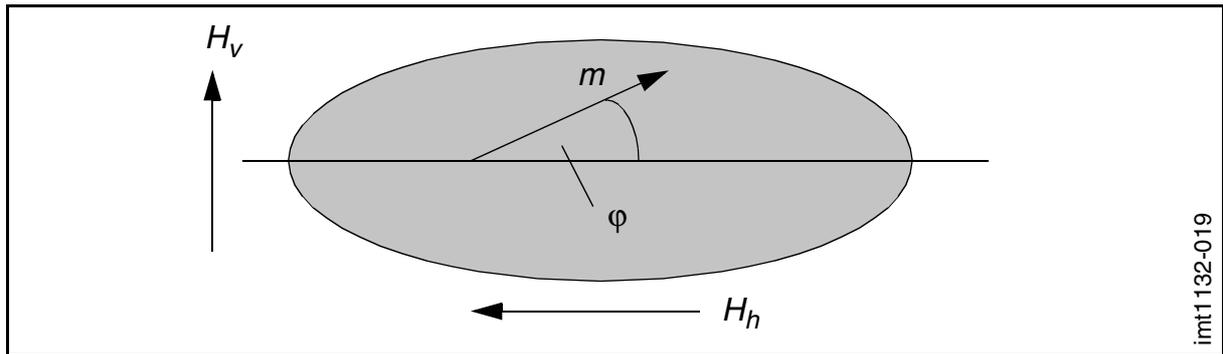


Bild 2.18: Ellipsoides, uniaxiales Teilchen mit homogener Magnetisierung

Das untersuchte Teilchen ist ein Ellipsoid mit uniaxialer Anisotropie und homogener Magnetisierung. Die Lage der Magnetisierung kann durch die Winkel ϑ und φ beschrieben werden. H_h und H_v sind die horizontale und vertikale Komponente des externen Feldes. Da es sich um ein sehr kleines Teilchen handelt, kann die Magnetisierung als homogen angenommen werden, und somit handelt es sich hierbei um einen eindomänigen Zustand. Für den planaren Fall (**Bild 2.18**), bei dem nur der Winkel φ berücksichtigt werden muß, läßt sich die gesamte Energiedichte beschreiben durch:

$$e_{tot} = g(\varphi) - H_h J_s \cos\varphi - H_v J_s \sin\varphi \quad (2.34)$$

$g(\varphi)$ ist das generalisierte Anisotropiefunktional. Im statischen Gleichgewichtszustand muß die erste Ableitung von Gl. 2.34 verschwinden, d.h.:

$$\frac{\partial e_{tot}}{\partial \varphi} = g'(\varphi) + H_h J_s \sin\varphi - H_v J_s \cos\varphi = 0 . \quad (2.35)$$

Um stabile Gleichgewichtszustände zu erzwingen, muß die zweite Ableitung von Gl. 2.34 positiv sein. Weiterhin müssen auch metastabile Zustände zugelassen werden. Besondere Bedeutung hat die Grenze zwischen dem stabilen und instabilen Zustand, ausgedrückt durch:

$$\frac{\partial^2 e_{tot}}{\partial \varphi^2} = g''(\varphi) + H_h J_s \cos\varphi + H_v J_s \sin\varphi = 0 . \quad (2.36)$$

Der Schalt­punkt ist definiert als das Erreichen dieser Grenze, wobei der ursprünglich metastabile Zustand instabil wird und das Teilchen in eine neue, stabile

Konfiguration schaltet. Durch die Kombination von Gl. 2.35 und Gl. 2.36 erhält man ein Gleichungssystem für die Stabilitätsgrenze, also einen Verlauf des Schaltpunktes. Für eine uniaxiale Anisotropie (Gl. 2.7) zweiter Ordnung und deren erste und zweite Ableitung, kann die Kurve des Schaltpunktes (Stoner-Wohlfarth Asteroid, Bild 2.19) des reduzierten Feldes $h = H \frac{J_s}{2K}$ beschrieben werden durch:

$$h^*_h = -\cos^3 \varphi, \quad h^*_v = \sin^3 \varphi. \quad (2.37)$$

Ebenfalls in reduzierten Größen ($h = H \frac{J_s}{2K}$, $\varepsilon_{tot} = \frac{e_{tot}}{K}$) ergibt sich für die Gesamtenergie:

$$\varepsilon_{tot} = \sin^2 \varphi - 2h_h \cos \varphi - 2h_v \sin \varphi \quad (2.38)$$

Am Beispiel des Stoner-Wohlfarth Modells können verschiedene Schaltvorgänge untersucht werden, die für das Verständnis komplexerer Schaltvorgänge in nicht homogen magnetisierten, größeren Teilchen hilfreich sind. Folgend werden die asymmetrischen, kontinuierlichen und katastrophalen Schaltvorgänge beschrieben.

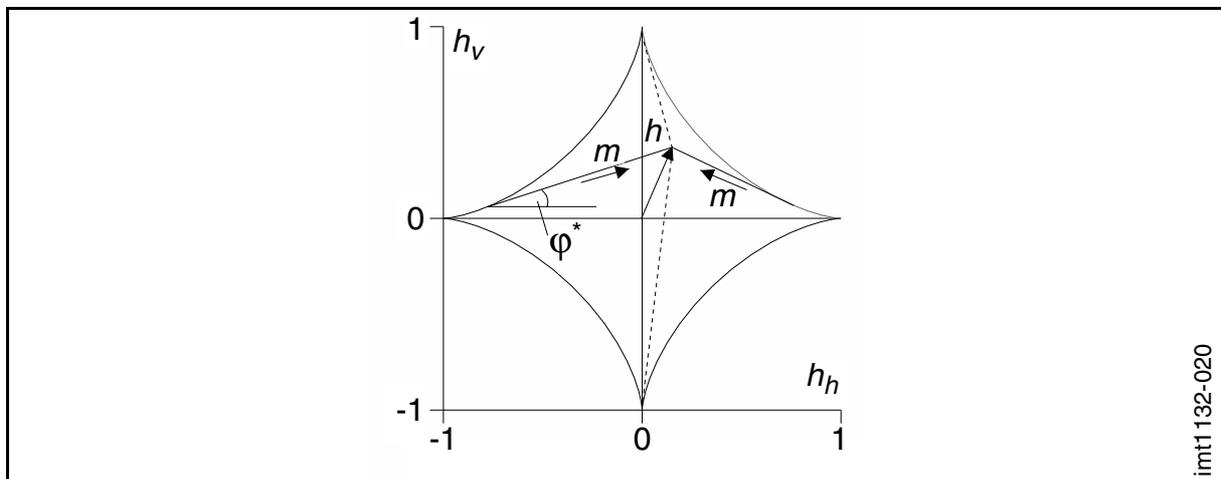


Bild 2.19: Stoner-Wohlfarth Asteroid

2.5.2 Asymmetrisches Schalten

Bei dem asymmetrischen Schalten liegt das externe Feld so, daß es innerhalb des Asteroiden, jedoch nicht entlang einer der Symmetrieachsen liegt (Bild 2.20). Verschiedene Verläufe der reduzierten Gesamtenergie sind dargestellt für die Erregung des Ellipsoids durch ein variierendes, horizontales Feld bei konstantem vertikalen Feld. Die dick gekennzeichnete Linie zeigt, wie das Energieminimum bei Erreichen des Instabilitätspunktes in ein anderes Energieminimum schaltet. Stellt man für diesen Fall die Suszeptibilität χ ($\chi = \partial\varphi_o/\partial h_h$) in ihrer Inversen ($\frac{1}{\chi}$) und quadrierten Inversen ($1/\chi^2$) dar, so erkennt man (Bild 2.21), daß sich die inverse Suszeptibilität dem Schaltpunkt auf einer vertikalen Tangente nähert. Die quadrierte Suszeptibilität hingegen nähert sich fast linear dem Schaltpunkt. Es läßt sich daher mit Hilfe der quadrierten inversen Suszeptibilität der genaue Schaltpunkt extrapolieren.

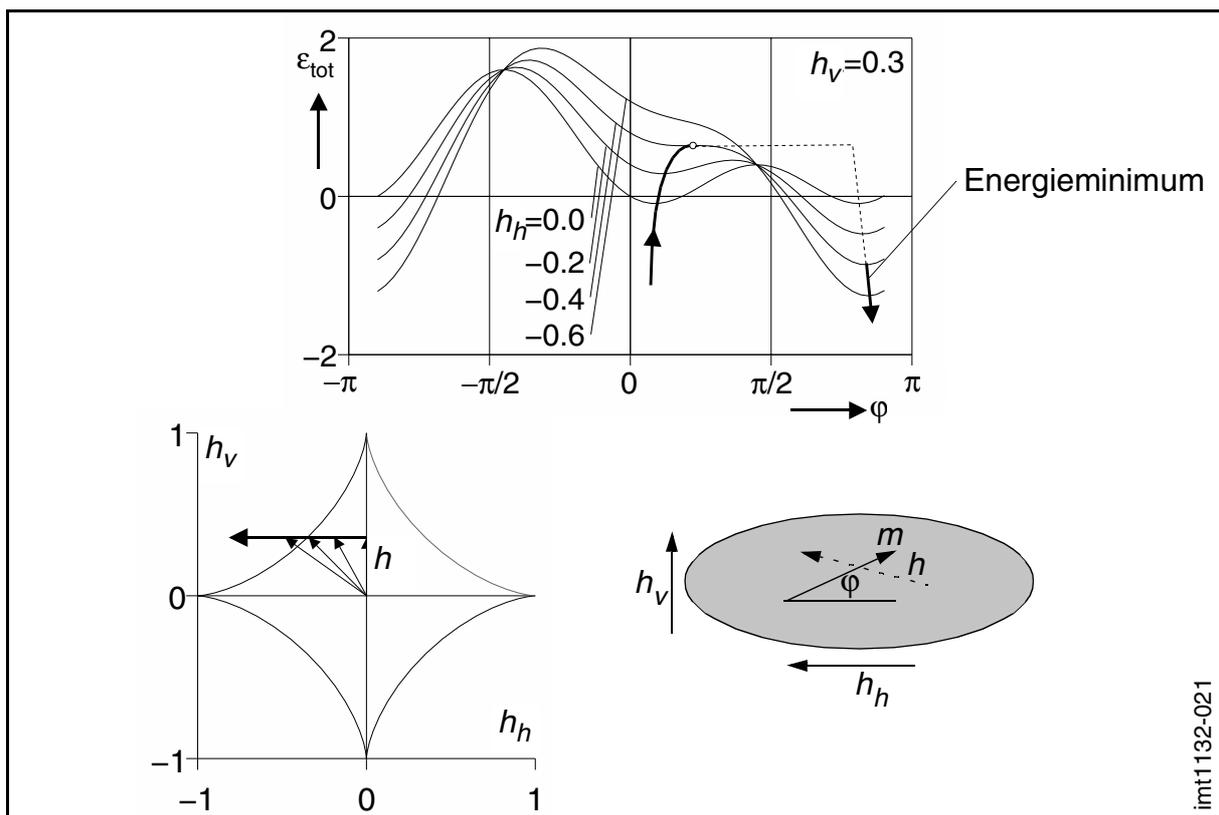


Bild 2.20: Asymmetrisches Schalten

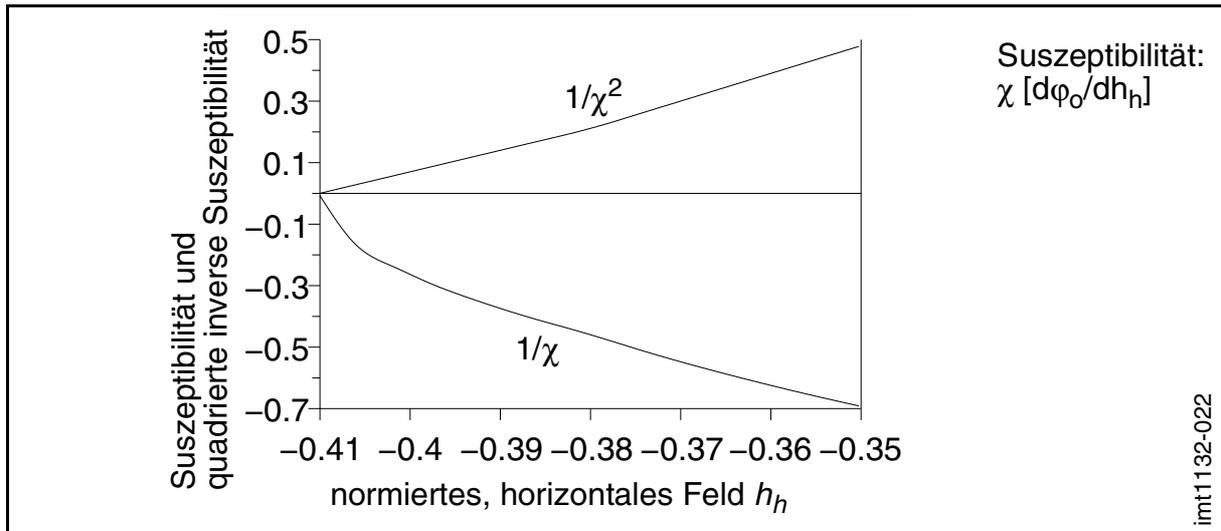


Bild 2.21: Die inverse und quadrierte inverse Suszeptibilität

2.5.3 Kontinuierliches Schalten zweiter Ordnung

Ein Sonderfall tritt bei einer externen Erregung des Systems auf, bei der die horizontale Komponente des Feldes Null ist, d.h. die Erregung senkrecht zur Anisotropieachse liegt. Bei dieser Anordnung bleibt die Magnetisierung unverändert bis zum Schalterpunkt und schaltet dann kontinuierlich und symmetrisch (Bild 2.22). Um den Schalterpunkt zu bestimmen, kann der quadrierte Winkel der Magnetisierung extrapoliert werden.

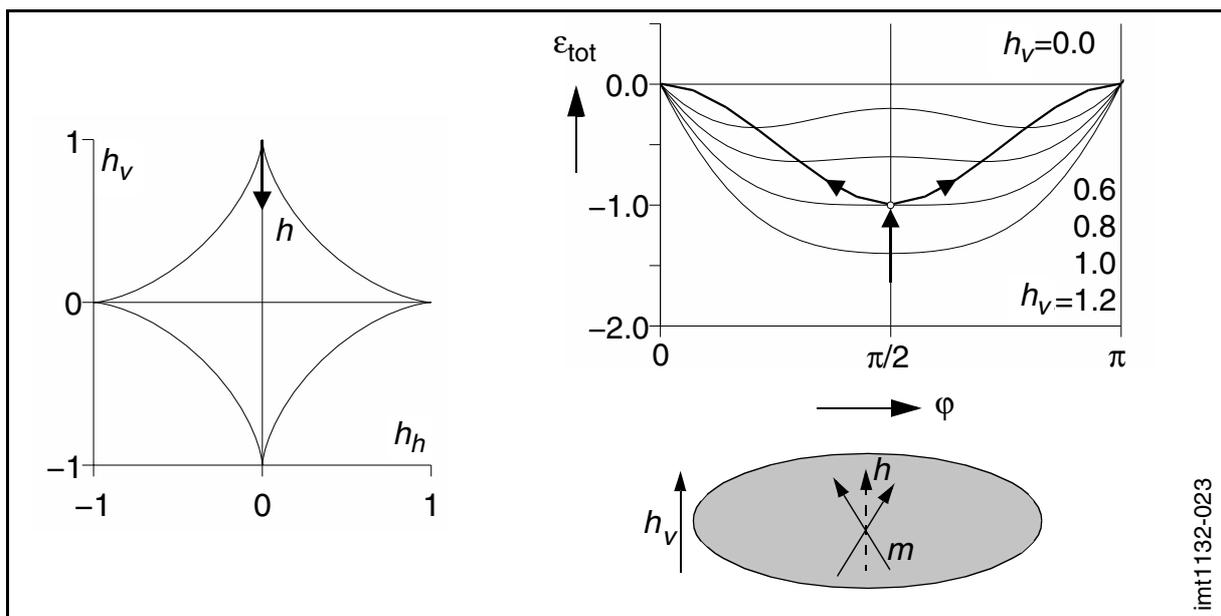


Bild 2.22: Kontinuierliches Schalten zweiter Ordnung

2.5.4 Unvorhergesehenes, katastrophales Schalten

Ein hier gesondert betrachteter Schaltvorgang beschreibt den Fall, bei dem das Feld parallel zur Anisotropieachse liegt, d.h. die vertikale Komponente Null ist. Der Darstellung der Energien und der darin eingezeichneten Kurve der Energieminima (Bild 2.23) kann man entnehmen, daß ein Schalten nicht angekündigt wird, sondern daß sich erst beim Erreichen des Schaltpunktes die Lage des Minimums verändert.

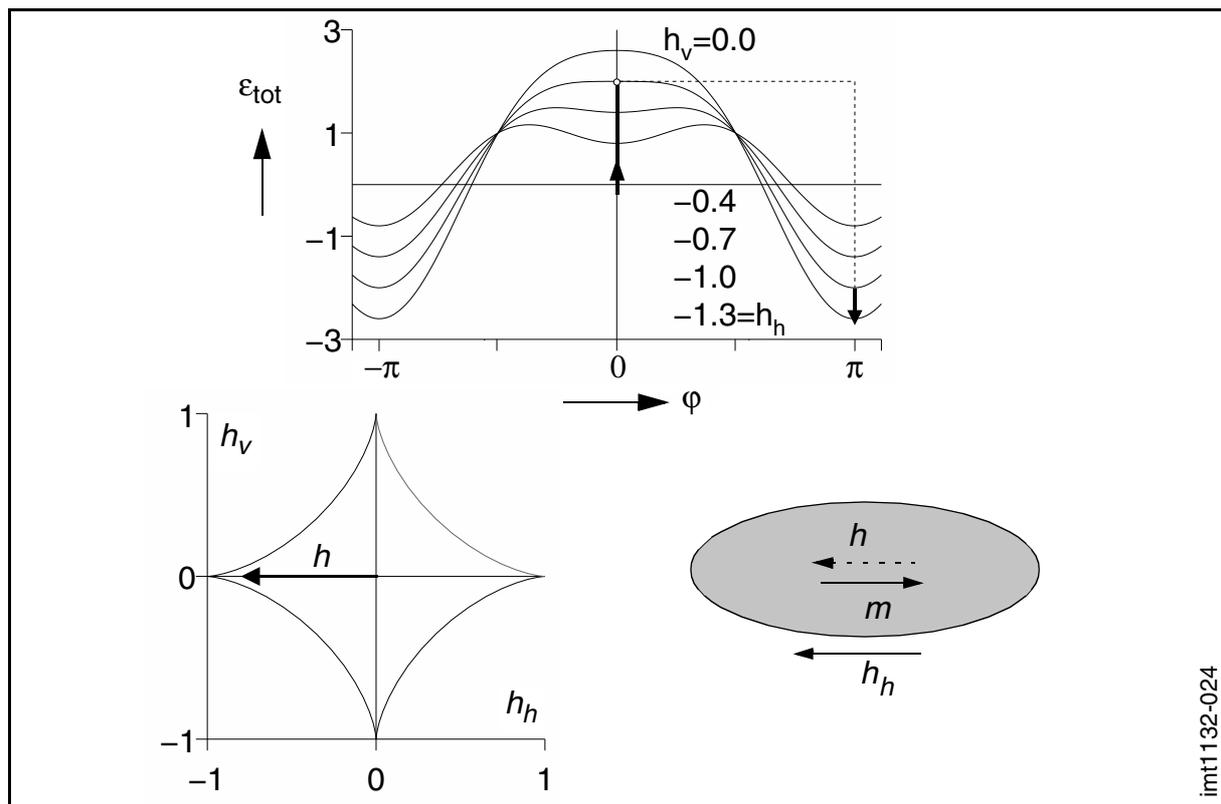


Bild 2.23: Unvorhergesehenes, katastrophales Schalten

2.6 Magneto-resistiver Effekt

Das quantitative und qualitative Messen von magnetischen Feldern ist eine Herausforderung für die magnetische Sensortechnologie. Magnetische Sensoren werden z.B. in der Automobiltechnik oder auch in der Festplattentechnik eingesetzt. Der Bedarf an Sensoren mit großer Empfindlichkeit ist sehr hoch und führt zur Verwendung unterschiedlichster Techniken. In den letzten Jahren ist für die Messung magnetischer Felder die Anwendung des allgemeinen, anisotropen magneto-resistiven Effektes immer stärker in den Vordergrund gerückt. Das Verständnis der Magnetisierungsprozesse in den Schichten ist wichtig, um die magnetischen und damit elektri-

schen Eigenschaften der Sensoren optimieren zu können. Der numerische Mikromagnetismus kann einen Einblick in die Magnetisierungsvorgänge im Sensor bieten. Dies ist durch die einfache Beobachtung von gemessenen elektrischen Größen nicht möglich.

Im folgenden soll nun die für das Verständnis notwendige Theorie vorgestellt werden. Der auf dem allgemeinen anisotropen, magnetoresistiven Effekt basierende Sensor ändert seinen elektrischen Widerstand in Abhängigkeit eines externen Feldes. Dieser Effekt zeigt einen Zusammenhang zwischen der Orientierung der Magnetisierung und der Richtung des Stroms. Für eine senkrecht zur Stromrichtung liegende Magnetisierung ist der spezifische Widerstand ρ_{\perp} minimal, für eine parallele Magnetisierung ist er maximal (ρ_{\parallel}). Der Ursprung der magnetoresistiven Eigenschaften läßt sich in der Spin-Bahn-Wechselwirkung finden, also in der Wechselwirkung zwischen den Spins der Elektronen und dem Kristallgitter [MCG75]. Die 3s-Elektronen, die sich parallel zur Magnetisierung bewegen, haben eine höhere Streuwahrscheinlichkeit in das 3d-Band, als sich senkrecht dazu bewegendende 3d-Elektronen. Diese aus der quantenmechanischen Störungsrechnung gewonnenen Erkenntnisse erklären aber das Phänomen des Magnetowiderstands nur qualitativ. Der Zusammenhang zwischen dem spezifischen Widerstand ρ und dem Winkel θ zwischen Magnetisierungsvektor und Stromrichtung ist in Gl. 2.39 beschrieben:

$$\rho = \rho_{\perp} + (\rho_{\parallel} - \rho_{\perp}) \cos^2 \theta = \rho_{\perp} + \Delta\rho \cos^2 \theta \quad (2.39)$$

Für die praktische Anwendung ist die relative Änderung der Empfindlichkeit $\Delta\rho/\rho$ des Sensors von Interesse. Werte für polykristalline Schichten liegen im Bereich von wenigen Prozent. Trägt man Gl. 2.39 auf, wie in [Bild 2.24](#) dargestellt, so ist zu erkennen, daß der optimale Arbeitspunkt bei einem Winkel von $\pm 45^\circ$ bezüglich des Stromes auftritt. Dort ist die Änderung des spezifischen Widerstands am größten. Um den Arbeitspunkt des Sensors auf diesen Bereich einzustellen, gibt es unterschiedliche Prinzipien. Die Methode der dualen Anordnung zweier magnetoresistiver Elemente wird am Institut für Mikrotechnologie eingesetzt. Sie findet ihre Anwendung in einem dualen Sensor [SCH99]. Bei dieser Methode werden vom Sensorstrom selbst erzeugte Felder genutzt, um die Rotation der Magnetisierung in den Bereich maximaler Sensitivität zu bekommen.

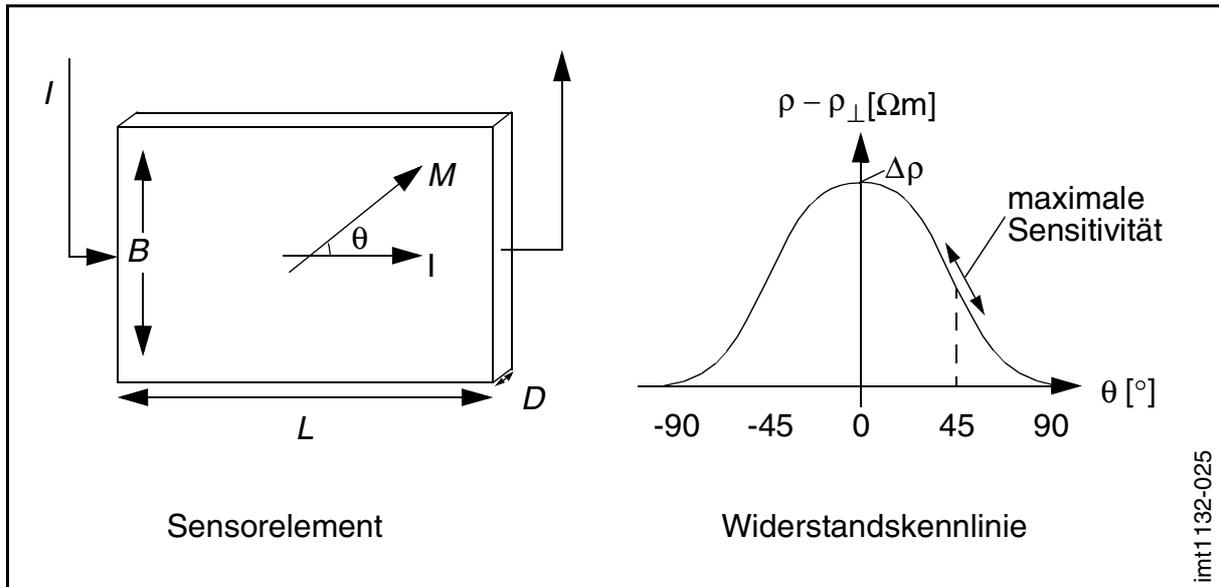


Bild 2.24: Magneto-resistives Sensorelement und die Widerstandskennlinie

Doch nicht nur die relative Widerstandsänderung $\Delta\rho/\rho$ geht in die Empfindlichkeit ein, sondern auch das Verhältnis der Widerstandsänderung zu der Änderung der magnetischen Feldstärke. Somit ist die Anisotropiefeldstärke H_k eine zusätzliche, relevante Größe. Für strukturierte Schichten ist neben der magnetischen Anisotropie die Formanisotropie eine wichtige Größe. Diese ergibt sich aus dem Streufeld und ist oftmals um eine Größenordnung höher als die Anisotropiefeldstärke. Somit muß neben den Materialparametern auch die Geometrie zur Optimierung des Sensorverhaltens beachtet werden.

3 Aufgabenstellung und Zielsetzung

In der Mikrotechnik werden schon lange mikromagnetische Eigenschaften ausgenutzt. Deshalb ist es von großem Interesse mittels numerischer, mikromagnetischer Simulationstechnik Aussagen über die Magnetisierungsverteilungen treffen zu können. Allerdings ist die Zeit- und Rechneranforderung solcher Simulationen extrem hoch. Dies reduziert somit die Einsatzmöglichkeit für die Anwendung auf Mikrosysteme. Die Aufgabe ist es, die Effizienz dieser Simulationstechnik zu steigern, um die hohe Anzahl nötiger Berechnungen zu bewältigen. Diese Berechnungen sollen an einfachen Strukturen durchgeführt werden, deren mikromagnetisches Verhalten von Interesse ist. Das Schaltverhalten und in diesem Zusammenhang die Hysterese dieser Strukturen ist von Bedeutung. Weiterhin sollen aus den Simulationen der Magnetisierungsverteilungen magnetoresistive Eigenschaften bestimmt werden. Ziel dieser Arbeit ist es, effizienzsteigernde Methoden zu entwickeln, und zwar sowohl für zweidimensionale, als auch dreidimensionale Simulationen. Durch eine Reduzierung der benötigten Rechenzeiten der mikromagnetischen Simulationen, kann ein Schritt in die Richtung der Verwendbarkeit für größere Systeme erfolgen. Zudem sollen an zwei geometrischen Grundelementen, dünne Schichtstrukturen und kleine Würfelemente, intensive simulationstechnische Untersuchungen vorgenommen werden. Die Simulationen sind sowohl für den Fall, daß kein externes Feld anliegt, als auch für den Fall einer Erregung durch ein externes Feld durchzuführen. Liegt keine Erregung vor, sind die magnetischen Grundkonfigurationen zu bestimmen. Bei den dünnen Schichtstrukturen kann dies in Abhängigkeit des Längenverhältnisses geschehen. Die Ergebnisse der kleinen Würfelemente unterscheiden sich in der Wahl der Materialeigenschaften. Ein weiteres Interesse gilt der feldabhängigen Magnetisierungsverteilung. Hierbei interessieren die Schaltfelder und das Verhalten beim Schalten. Um nicht nur eine Aussage zu den Schaltvorgängen von den gewählten Beispielen zu erhalten, sondern um eine Vorgehensweise zur systematischen Untersuchung von Schaltvorgängen im allgemeinen zu finden, ist es erforderlich, die Geometrie und die Materialeigenschaften so zu wählen, daß die gängigen Schaltvorgänge gezeigt und analysiert werden können. Zusätzlich ist es das Ziel, am Beispiel magnetoresistiver Sensoren, die Verwendbarkeit der Ergebnisse mikromagnetischer Simulationen zu demonstrieren. Hierfür sollen magnetoresistive Kennlinien berechnet werden. Die Abhängigkeit von dem Längenverhältnis der Schichten ist herauszustellen.

4 Vorgehensweise

Die Vorgehensweise leitet sich aus der Aufgabenstellung und Zielsetzung ab. Eine Übersicht der notwendigen Abfolge zeigt Bild 4.1.

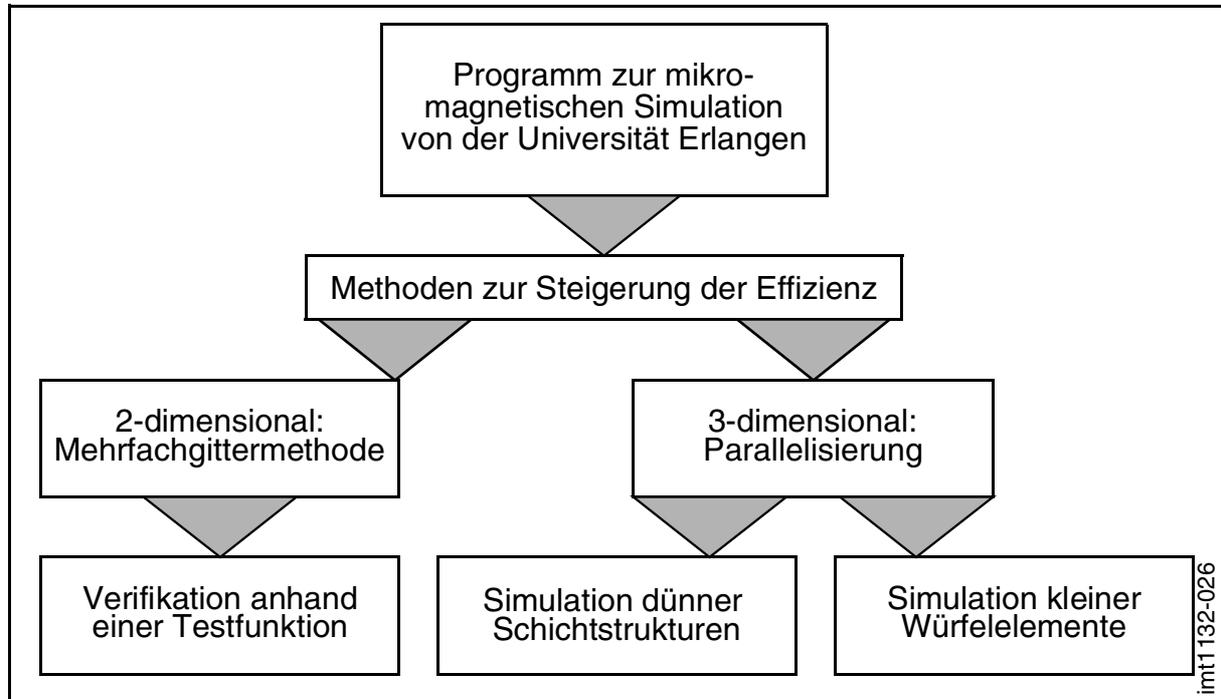


Bild 4.1: Ausgangsprogramm, Erweiterungen und Anwendungen

Ausgangslage ist die Anwendung eines vorhandenen Programms von der Universität Erlangen. Dieses ermöglicht bereits zwei- und dreidimensionale Simulationen mikromagnetischer Probleme. Da die mikromagnetische Simulationstechnik extrem rechenintensiv ist, werden Methoden entwickelt, um die Effizienz der Simulation zu steigern und somit die Rechenzeiten zu reduzieren. Bei zweidimensionalen Simulationen steht die Entwicklung einer Mehrfachgittermethode im Vordergrund. Die Verifikation der Methode wird anhand einer Testfunktion durchgeführt. Um die Effizienz dreidimensionaler Simulationen zu steigern, wird eine Parallelisierung der Simulation auf einem Mehrprozessorcomputer angestrebt. Dies ermöglicht die Rechenzeiten für Simulationen zu reduzieren, um die anschließenden Untersuchungen dünner Schichtstrukturen und kleiner Würfелеlemente effizienter zu gestalten. Die Vorgehensweise bei der Untersuchung dieser beiden Beispiele wird im folgenden getrennt voneinander vorgestellt.

5 Grenzen und Möglichkeiten der Modellierung

5.1 Einleitung

Die in Kapitel 2 beschriebene Theorie des Mikromagnetismus und die entsprechende *Brownsche* und *Landau-Lifshitz-Gilbert* Gleichung kann programmiertechnisch in ein Computerprogramm umgesetzt werden. Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Programm stammt von der Universität Erlangen und ist vom kürzlich verstorbenen Prof. Hubert entwickelt worden [RAM97] (Es soll im folgenden als *Programm Hubert* bezeichnet werden.). Es dient als Basis für die in dieser Arbeit durchgeführten effizienzsteigernden Maßnahmen und den in Kapitel 6 und Kapitel 7 beschriebenen Untersuchungen. In Kapitel 5.2 wird das Programm Hubert vorgestellt. Anschließend werden in Kapitel 5.3 die Grenzen in Bezug auf Rechenzeit und Speicherbedarf aufgezeigt. Um diese Grenzen auszudehnen werden zwei eigens entwickelte Methoden vorgestellt. Für dreidimensionale Simulationen wird das Programm Hubert parallelisiert, um auf einem Mehrprozessorcomputer rechnen zu können (Kapitel 5.4). Eine zweite Methode ist die in Kapitel 5.5 vorgestellte Mehrfachgittermethode. Sie beschränkt sich bei der hier entwickelten Darstellung auf zweidimensionale Simulationen. Eine Ausweitung auf die dritte Dimension ist denkbar, wird in dieser Arbeit jedoch nicht durchgeführt.

5.2 Beschreibung des verwendeten Simulationsprogrammes

Das Programm Hubert besteht aus einer Reihe von Grundmodulen. Diese Module sind ausschließlich in Fortran programmiert und werden von einem eigens geschriebenen Hauptprogramm gesteuert. Eine Aufstellung der benötigten Grundmodule bei einer mikromagnetischen Simulation zeigt [Bild 5.1](#). Begonnen wird mit dem Einlesen der Parameter, die für die Simulation erforderlich sind. Dies sind die geometrische Größe des Modells und die Zahl der Elemente in den drei Raumrichtungen. Es können nur quaderförmige Objekte mit gleichmäßigen Gittern verwendet werden. Dies liegt in der Natur der Methode zur Streufeldberechnung, die im Detail bereits in Kapitel 2 erläutert wurde. Weiterhin werden Materialeigenschaften und Parameter zur Steuerung der Simulation, wie z.B. das Abbruchkriterium, festgelegt. Im Anschluß werden die Wechselwirkungskoeffizienten berechnet. Diese ergeben sich ausschließlich aus der Geometrie und der Wahl der Diskretisierung und können somit am Anfang

der Simulation errechnet werden.

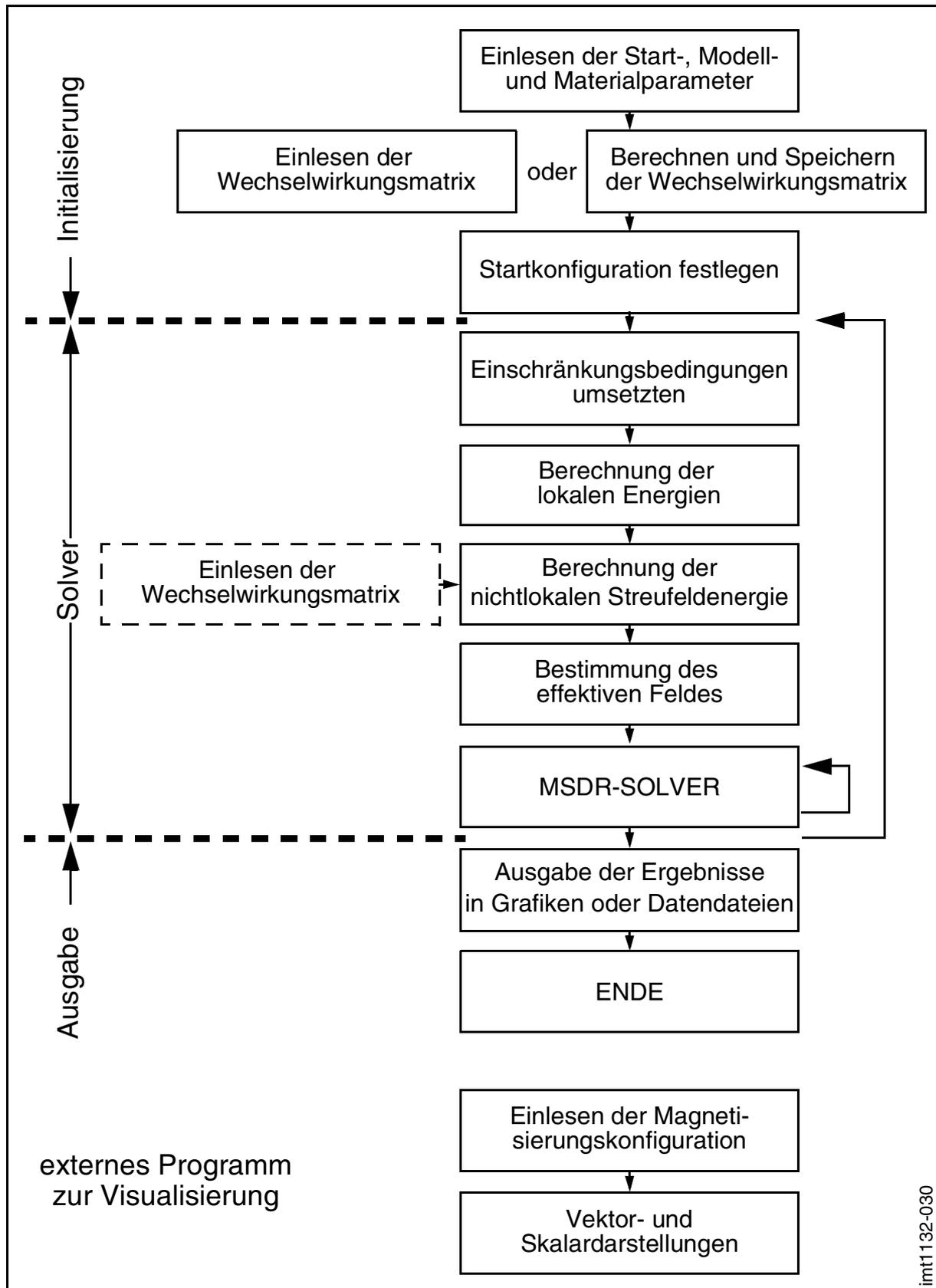


Bild 5.1: Ablauf bei einer mikromagnetischen Simulation

Da diese Wechselwirkungsmatrix sehr viel Speicherplatz in Anspruch nehmen kann, bietet das Programm die Möglichkeit diese entweder für den gesamten Zeitraum der Simulation im Speicher zu halten oder abzuspeichern und bei Bedarf wieder einzulesen. Die zweite Variante ermöglicht es, den gesamten Speicherbedarf zu reduzieren, erhöht jedoch stark den Rechenzeitbedarf. Werden mehrere Rechnungen bei gleicher Geometrie und Diskretisierung erforderlich, so muß nicht bei jedem Neustart die Wechselwirkungsmatrix neu berechnet werden, sondern es kann auf die zuvor gespeicherte Datei zugegriffen werden. Bei großen Modellen führt dies zu einer erheblichen Reduzierung der Rechenzeit. Die Startkonfiguration beinhaltet die Ausgangsverteilung der Magnetisierungen. Es existieren eine Reihe von möglichen Startfunktionen, die je nach Anforderung ausgewählt werden müssen. Eine detaillierte Beschreibung hierzu ist in Kapitel 6 dargestellt. Die bis zu diesem Punkt durchgeführten Module werden als „Initialisierung“ bezeichnet. Sie werden nur einmal am Anfang der Simulation benötigt. Die einer Iteration unterliegenden Module werden als „Solver“ bezeichnet. Die Umsetzung der Einschränkungsbefingung ist eine dieser Module. Hier werden vom Benutzer vorgegebene Einschränkungen der Bewegungsfreiheit von ausgezeichneten Magnetisierungen überprüft und erzwungen. Die verschiedenen Arten der Einschränkungsbefingungen werden in Kapitel 6 und Kapitel 7 detailliert beschrieben. Im Anschluß werden die Energien berechnet. Die lokalen Energien sind die Austauschkopplungs-, Anisotropie- und Zeeman-Energie. Die nichtlokale Energie ist die Streufeldenergie. Sie benötigt die in der Initialisierung berechnete Wechselwirkungsmatrix. Im Anschluß kann das effektive Feld, wie in Kapitel 2.1.3 beschrieben, berechnet werden. Dieses bildet die Grundlage für den sogenannten MSDR-Solver, welcher in Kapitel 2.2.3 beschrieben wurde. Der Solver beinhaltet eine Iterationsschleife, um den Dämpfungsparameter β anzupassen. Wird eine Magnetisierungskonfiguration erreicht, welche zu einer Verringerung der Energie führt, so wird eine neue Iteration begonnen. Das Abbruchkriterium der Iteration ist ein magnetisches Moment nach Gleichung 2.20. Unterschreitet dieser Wert einen Richtwert, so bricht die Simulation ab und die Ergebnisse werden ausgegeben. Dies kann in Form von Datendateien geschehen, in denen vorher definierte Größen, wie z.B. die Energien und die mittlere Magnetisierung, abgespeichert werden. Es kann aber auch die gesamte Magnetisierungskonfiguration ausgegeben werden, um die Ergebnisse einer nachfolgenden Visualisierungssoftware zugänglich zu machen. Diese ermöglicht grafische Vektor- und Skalardarstellungen.

5.3 Grenzen des verwendeten Simulationsprogrammes

Der große Unterschied zwischen der Größe der Domänen und der Ausweitung der Domänenwände führt dazu, daß eine sehr hohe Diskretisierung der Struktur erforderlich ist. Dies wiederum führt zu einer sehr hohen Anzahl von Elementen. Hinzu kommt, daß die Verwendung der FFT ein regelmäßiges Gitter erfordert. Die notwendige Auflösung der Domänenwände bestimmt somit die Diskretisierung des gesamten Modells. Im Bereich der Domänen führt dies zu einer unnötigen Überdiskretisierung. Dieser Tatbestand ist nicht allein verantwortlich für die hohen Rechenzeiten. Die hohe Anzahl der Elemente in Verbindung mit der sehr zeitintensiven Berechnung der nicht-lokalen Streufeldenergie führt dazu, daß die Größe der Modelle stark eingeschränkt ist. Eine Simulation einer dünnen Schicht der Größe $12\ \mu\text{m} \times 6\ \mu\text{m} \times 20\ \text{nm}$ benötigt für eine ausreichende Diskretisierung ca. 5 Mio. Elemente. Eine einzige Simulation erfordert in diesem Fall über 1 GB an Hauptspeicher und ca. 5 Tage Rechenzeit. Da bei mikromagnetischen Simulationen eine Vielzahl von Rechnungen nötig ist, ist dieser Bedarf an Speicher und Zeit mit der momentan zur Verfügung stehenden Hardware grenzwertig. Eine Erhöhung der Modellgröße führt zu einer überproportionalen Erhöhung von Speicherbedarf und Rechenzeit. Die rasante Entwicklung im Bereich der Hardware läßt immer größere Modelle rechnen. Eine Steigerung der Effizienz der mikromagnetischen Simulation ist eine weitere Möglichkeit diese Grenze auszuweiten.

5.4 Parallelisierung bei dreidimensionalen Simulationen

Die beschriebene Methode der Parallelisierung beinhaltet eine Änderung des vorhandenen Programms Hubert, um es auf einem Mehrprozessorcomputer lauffähig zu machen. Durch die Verteilung der Rechenoperationen auf mehrere Prozessoren, kann die insgesamt benötigte Zeit stark reduziert werden. Da der überwiegende Teil der Rechenzeit einer mikromagnetischen Simulation, d.h. der Bedarf an Prozessorzeit (CPU-Zeit), von der Berechnung des Streufeldes beansprucht wird und dieser wiederum fast ausschließlich in den Fast-Fourier-Transformationen liegt, lassen sich hier die höchsten Optimierungsmöglichkeiten erwarten. Für die Untersuchungen wurden unterschiedliche Methoden zur FFT Berechnung verwendet. Die hierbei eingesetzten Algorithmen und Programme wurden im einzelnen nicht selbst entwickelt, sondern von Software-Anbietern wie Netlib [PRE92] und FFTW [FRI99] übernommen. Die eigene Arbeit besteht in der Einbindung dieser Komponenten in das Simulations-

programm Hubert und in der Portierung der Software auf einen Mehrprozessorcomputer. Im folgenden werden zuerst Speicher- und Zeitbedarf von ein- und mehrdimensionalen FFT verglichen und ihre Einbindung in die Streufeldberechnung gezeigt.

5.4.1 Ein- und mehrdimensionale Fast-Fourier-Transformationen (FFT)

Im folgenden werden Untersuchungen vorgestellt, welche die Eignung dieser FFT-Routinen zur Streufeldberechnung demonstrieren. Eine Besonderheit einiger Routinen ist die Möglichkeit, mehrdimensionale Felder direkt zu lösen. Im Gegensatz hierzu stehen eindimensionale FFT Routinen, die auf mehrdimensionale Felder angewendet werden, indem die Dimensionen nacheinander eindimensional transformiert werden. Zwischen jeder Transformation ist eine Transponierung des Feldes erforderlich. Dies erhöht die Rechenzeit. Um zu untersuchen, inwieweit eine mehrdimensionale FFT Rechenzeit spart, wurde für zweidimensionale Felder die FFT durchgeführt und die Rechenzeit als CPU-Zeit in Millisekunden gemessen. [Bild 5.2](#) bis [Bild 5.4](#) zeigen die verwendete CPU-Zeit für ein Feld der Größe $M \times N$.

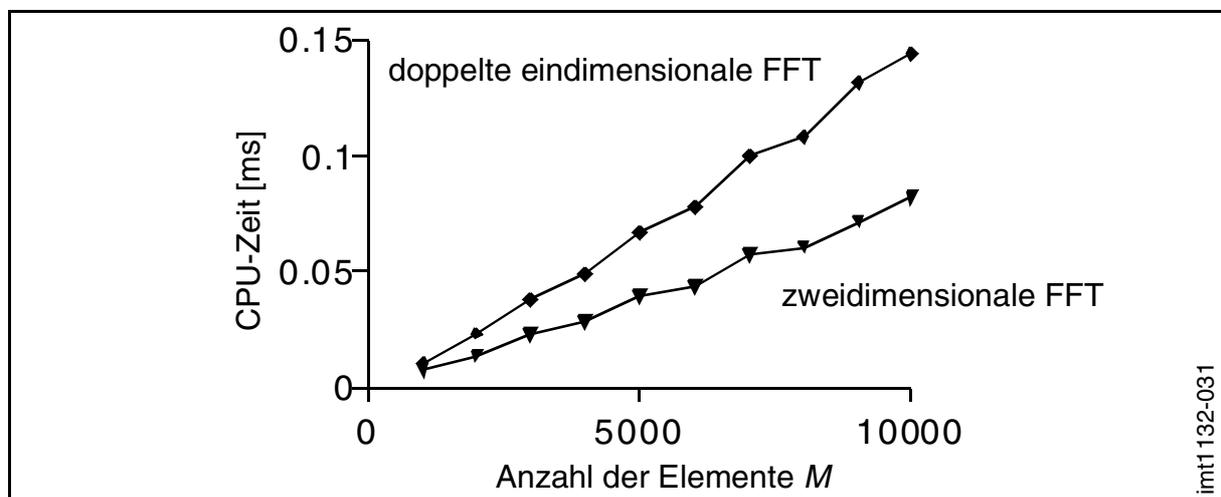


Bild 5.2: Benötigte CPU-Zeit einer zweidimensionalen FFT eines Feldes mit der Dimension $M \times N$, mit $N = 10$, bei der Verwendung einer doppelten eindimensionalen FFT und einer zweidimensionalen FFT.

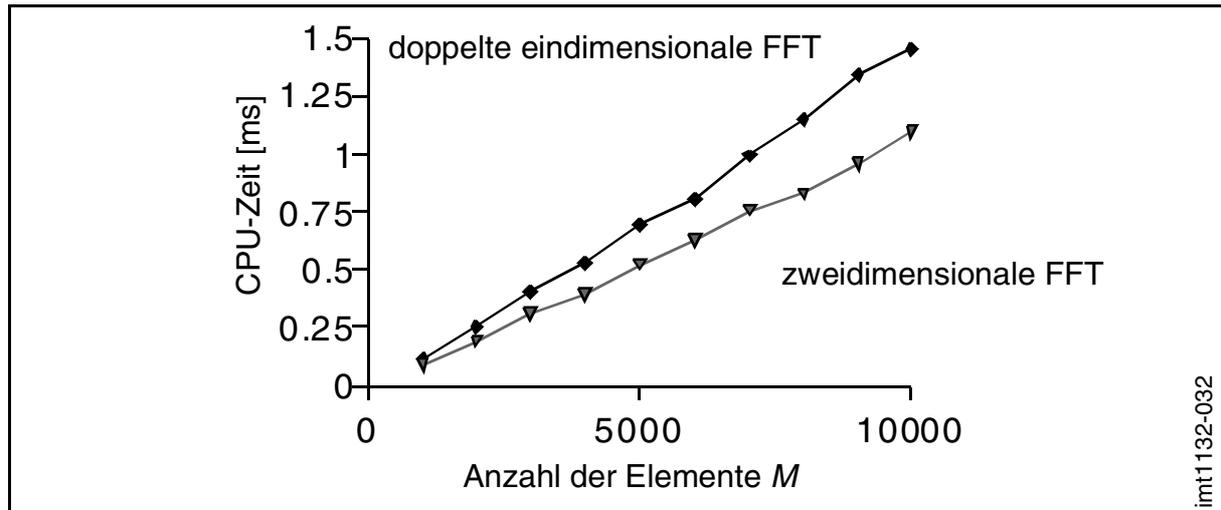


Bild 5.3: Benötigte CPU-Zeit einer zweidimensionalen FFT eines Feldes mit der Dimension $M \times N$, mit $N = 100$, bei Verwendung einer doppelten eindimensionalen FFT und einer zweidimensionalen FFT.

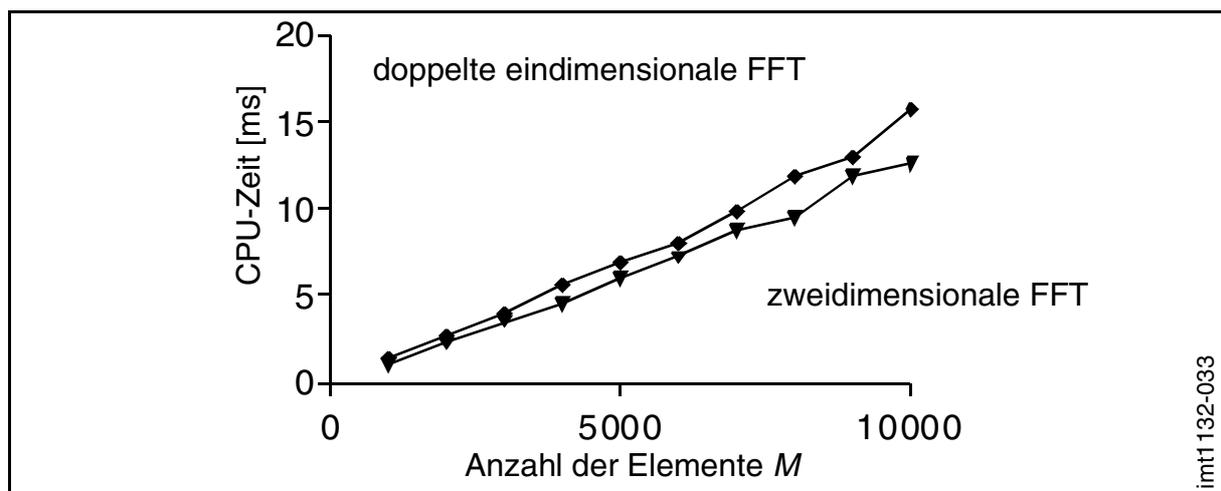


Bild 5.4: Benötigte CPU-Zeit einer zweidimensionalen FFT eines Feldes mit der Dimension $M \times N$ mit $N = 1000$, bei Verwendung einer doppelten eindimensionalen FFT und einer zweidimensionalen FFT.

Es ist deutlich, daß die zweidimensionale FFT für jede Feldgröße schneller ist, als die doppelte eindimensionale FFT. Mit zunehmender Größe von M steigt die Effizienz an. Allerdings zeigt sich auch, daß der Geschwindigkeitsvorteil mit zunehmender Dimension von N sinkt. Die zweidimensionale FFT besitzt dennoch immer Vorteile. Daher wurde die Streufeldberechnung so programmiert, daß die zweidimensionale FFT verwendet werden kann. Es hat sich aber gezeigt, daß es nicht sinnvoll ist,

ausschließlich mehrdimensionale FFT einzusetzen, da eine Verwendbarkeit von Zwischenergebnissen aus eindimensionalen FFT die Rechenzeit noch zusätzlich verringern kann. Diese Tatsache wird im folgenden detailliert beschrieben.

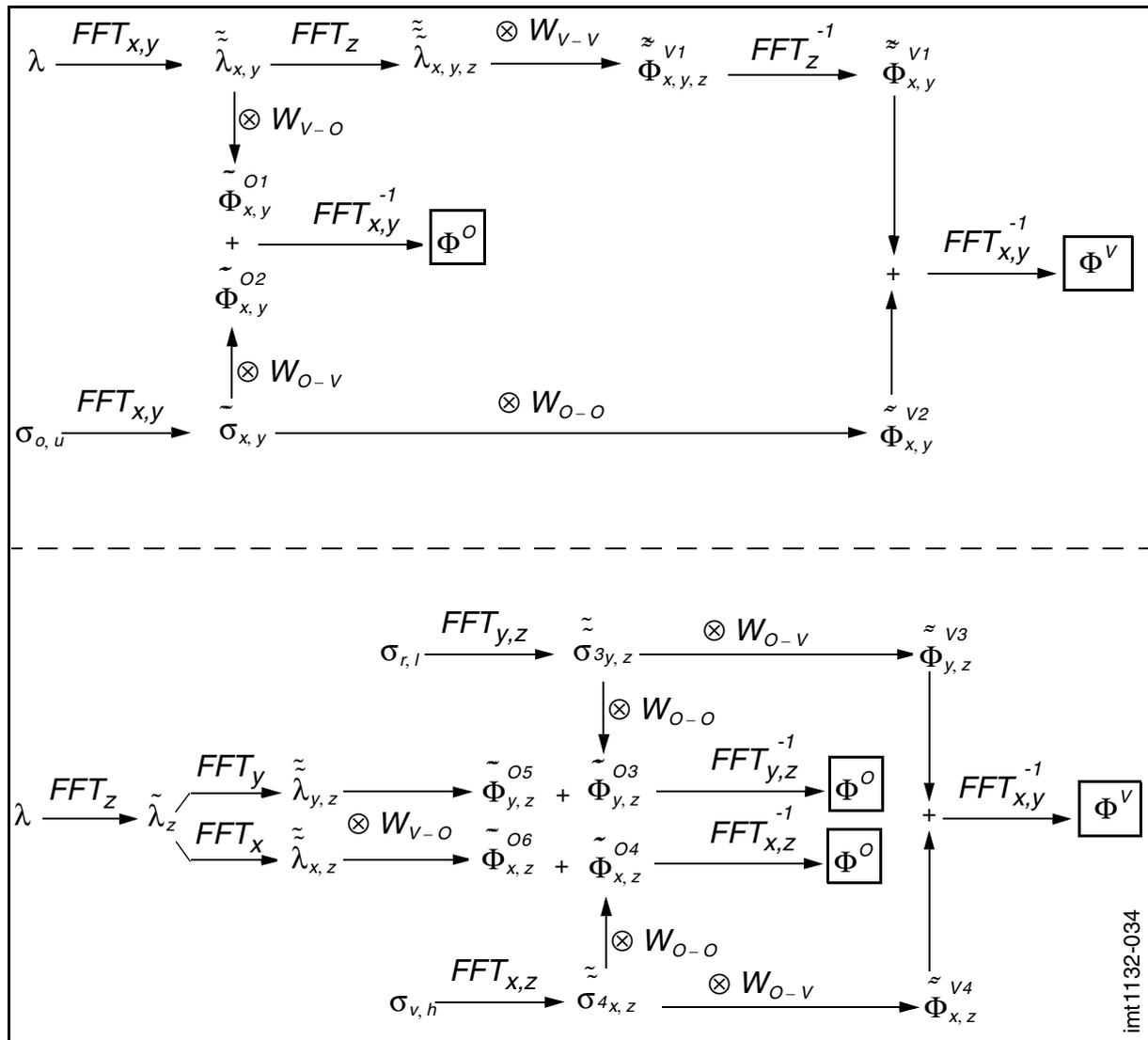


Bild 5.5: Berechnung des magnetischen Potentials mit Hilfe von ein- und mehrdimensionalen FFT

Das Prinzip der Streufeldberechnung unter Verwendung von ein- und mehrdimensionaler FFT ist in Bild 5.5 dargestellt. Die Bezeichnung FFT bedeutet eine Transformation, ihre Inverse (FFT^{-1}) eine Rücktransformation. Der Index zeigt an, in welche der drei Raumrichtungen die Transformation durchgeführt wurde. Ein einfacher Index weist auf eine eindimensionale FFT hin, ein mehrfacher auf die entsprechende mehrdimensionale FFT. Die verwendeten Ladungsverteilungen sind die Volumenladung λ

und die Oberflächenladung σ . Die Indizes der Oberflächenladung deuten an, welche Oberfläche des Körpers verwendet wird. Die Bezeichnungen r, l, o, u, v, h stehen für die rechte, linke, obere, untere, vordere und hintere Oberfläche. Eine Transformation einer Ladungsverteilung wird durch die Kennzeichnung mit einer Tilde deutlich gemacht. Mehrere Tilden entsprechen einer mehrfach angewendeten FFT. Um die einzelnen transformierten Ladungsverteilungen unterscheiden zu können, werden sie durchnummeriert. Zusätzlich zeigt die x, y, z-Indizierung, in welche Richtung eine FFT durchgeführt wurde. Werden transformierte Ladungsverteilungen mit einer Wechselwirkungsmatrix W gefaltet, so entsteht ein Potential Φ . Die Faltung mit W wird durch das Faltungssymbol und einem W_O für die Wechselwirkung mit der Oberfläche und W_V für die Wechselwirkung mit dem Volumen symbolisiert.

Es läßt sich der Gesamtablauf in zwei unabhängige Bereiche teilen. Im oberen Bereich wird die Volumenladung in alle drei Raumrichtungen transformiert. Das Ergebnis wird mit der Wechselwirkungsmatrix W_{V-V} des Volumens gefaltet. Anschließend wird eine schrittweise Rücktransformation durchgeführt, um das magnetische Potential im Volumen zu erhalten. Im nächsten Schritt wird die Ladungsverteilung der oberen und unteren Oberfläche zweidimensional transformiert und anschließend mit zwei Wechselwirkungsmatrizen gefaltet. Die eine Faltung dient der Berechnung des Beitrages zum Volumenpotential. Bei der zweiten führt die Kombination mit einer Zwischenlösung aus der vorherigen Transformation der Volumenladung zu dem Oberflächenpotential. Unabhängig von den bisherigen Rechnungen werden im zweiten Bereich die Beiträge zu dem Oberflächenpotential und dem Volumenpotential berechnet. Auch hier können Zwischenergebnisse verwendet und somit die Zahl der Transformationen reduziert werden. Die Volumenladung wird nach einer einfachen Transformation in Z-Richtung unabhängig voneinander in die X- und die Y-Richtung transformiert. Nach Faltung der Ergebnisse mit der entsprechenden Wechselwirkungsmatrix erhält man die Beiträge zum Oberflächenpotential. Die Ladungsverteilung der rechten, linken, vorderen und hinteren Oberfläche werden transformiert und mit entsprechenden Wechselwirkungsmatrizen gefaltet. Die Ergebnisse werden untereinander kombiniert und so zurücktransformiert, daß die Beiträge zu dem Oberflächenpotential und dem Volumenpotential entstehen. Diese Fülle von Operationen führt durch die Verwendung und Kombination von Zwischenlösungen zu einer Einsparung von Transformationsschritten und somit zu einer Reduzierung des Rechenzeitbedarfs.

5.4.2 Parallelisierung der Fast-Fourier-Transformationen

Da die Rechenzeit einer Simulation überwiegend von der Berechnung der FFT in Anspruch genommen wird, ist es sinnvoll, auch dort mit effizienzsteigernden Maßnahmen zu beginnen. Eine Möglichkeit bietet die parallelisierte Berechnung der Streufeldenergie. Dies bedeutet, daß mehrere Prozessoren gleichzeitig die FFT durchführen und somit Rechenarbeit geteilt wird. Die Umsetzung einer solchen Parallel-FFT ist eine rein programmiertechnische Arbeit. Aus diesem Grund wurde ein vorhandenes Paket [FRI99] verwendet, welches eine bereits parallelisierte FFT beinhaltet. Die mögliche Auswirkung auf den Rechenzeitbedarf zur Streufeldberechnung wird in [Bild 5.6](#) bis [Bild 5.8](#) dargestellt.

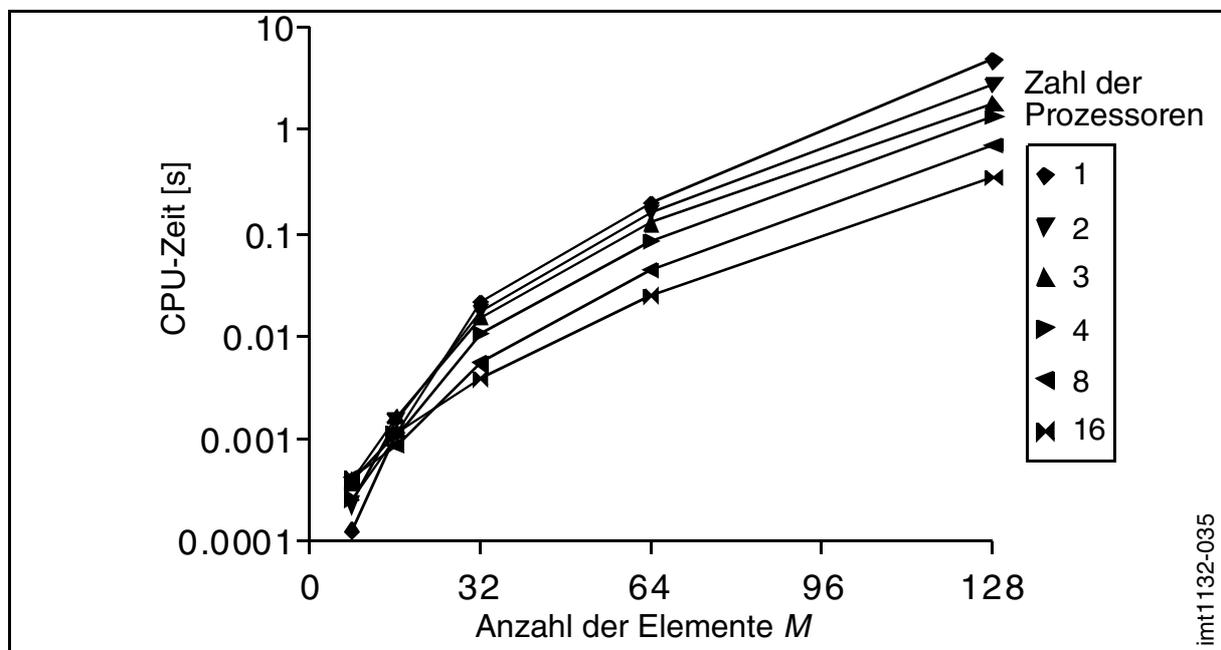


Bild 5.6: Rechenzeitbedarf in Sekunden in Abhängigkeit der Feldgröße einer dreidimensionalen FFT für eine verschiedene Anzahl von Prozessoren.

Die verwendeten Felder sind dreidimensional und besitzen die Größe $M \times M \times M$. Die Anzahl der Prozessoren betrug wahlweise 1, 2, 3, 4, 8 oder 16. Der aus diesen Rechnungen resultierende Bedarf an CPU-Zeit zeigt [Bild 5.6](#). Für große Felder ist eindeutig, daß eine Parallelisierung einen erheblichen Vorteil im Rechenzeitbedarf bringt. Vergleicht man die Ergebnisse der parallelisierten Rechnungen mit der konventionellen Rechnung eines einzelnen Prozessors, kann man den Geschwindigkeitsvorteil direkt darstellen. [Bild 5.7](#) zeigt dies für den genannten Fall. Aus dieser Ansicht wird

deutlich, daß der Geschwindigkeitsvorteil nicht unabhängig von der Feldgröße ist. Für eine kleine Feldgröße, z.B. $8 \times 8 \times 8$, ist eine parallelisierte Rechnung langsamer. Dies liegt daran, daß die Verteilung des Speichers auf die Prozessoren vor der Rechnung und das Zusammenführen des Speichers nach der Rechnung CPU-Zeit benötigt. Bei kleinen Feldern ist dieser Anteil im Vergleich zur Gesamtzeit hoch. Ein Maximum der Kurven ist bei ca. $64 \times 64 \times 64$ erreicht.

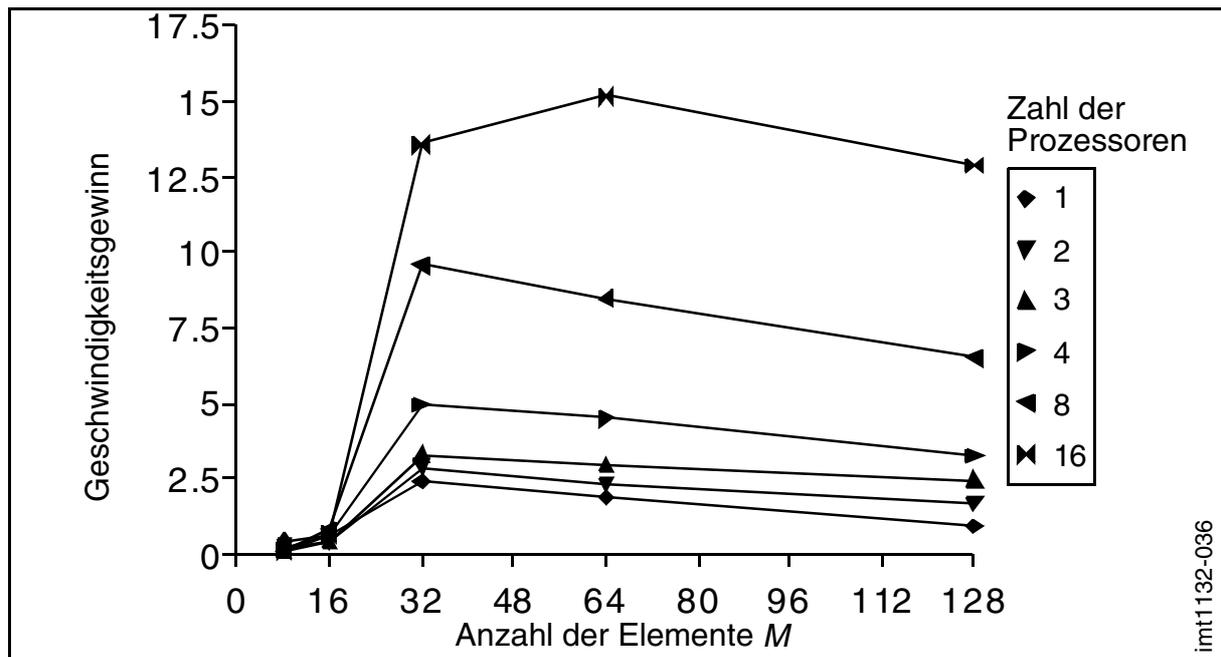


Bild 5.7: Geschwindigkeitsgewinn durch die Verwendung der Parallelisierung in Abhängigkeit der Feldgröße einer dreidimensionalen FFT für eine verschiedene Anzahl von Prozessoren.

Um den Einfluß der Anzahl der Prozessoren auf den Rechenzeitbedarf noch stärker zu verdeutlichen, zeigt [Bild 5.8](#) die CPU-Zeit für verschiedene Feldgrößen in Abhängigkeit der Anzahl der Prozessoren. Aus dieser Anschauung läßt sich erkennen, daß die Parallelisierung nicht nur für höhere Feldgrößen einen Geschwindigkeitsvorteil verschafft. Für die Anwendung der Parallelisierung der FFT bei der Streufeldberechnung konnte somit gezeigt werden, daß nur für sehr große Felder Geschwindigkeitsvorteile erzielt werden können. Bei den sehr rechenintensiven Untersuchungen an feindiskretisierten kleinen Wüfelementen oder dünnen Schichtstrukturen, hat die Parallelisierung deutliche Einsparungen an CPU-Zeit ermöglicht.

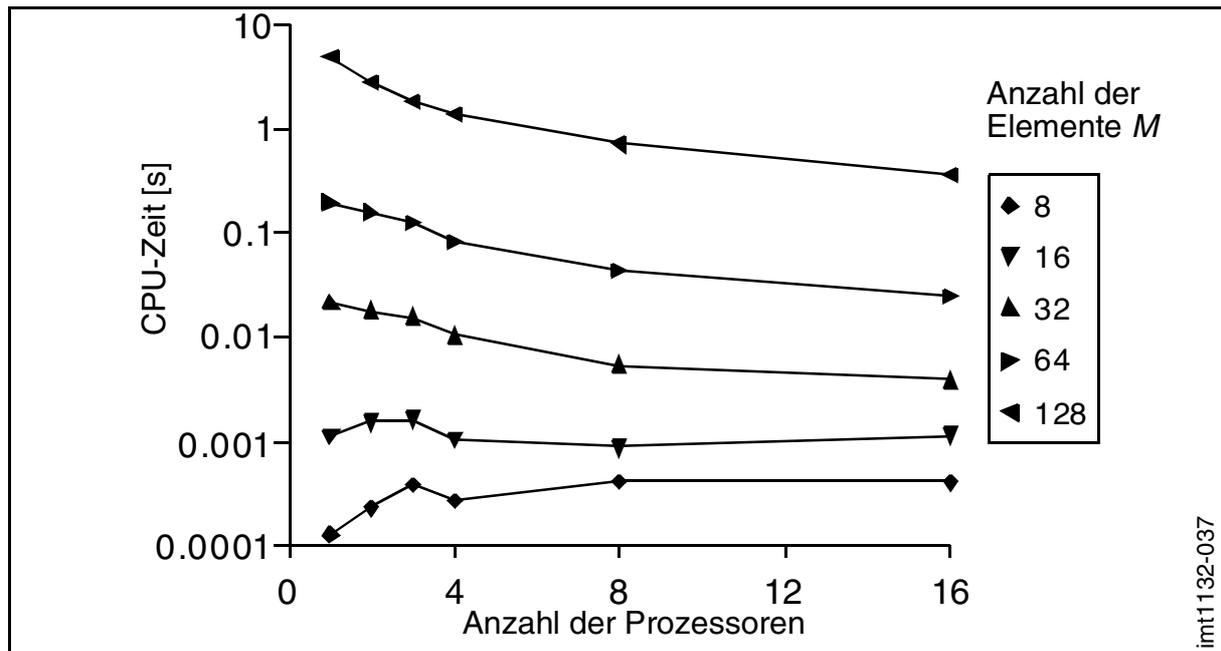


Bild 5.8: Rechenzeitbedarf in Sekunden einer dreidimensionalen FFT in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Prozessoren, für unterschiedliche Feldgrößen

5.5 Mehrfachgittermethode bei zweidimensionalen Simulationen

Die Verwendung der FFT bei der Streufeldenergieberechnung setzt ein regelmäßiges Gitter voraus. Dies bedeutet, daß der Bereich mit dem höchsten Diskretisierungsanspruch die Elementgröße aller Elemente im Modell bestimmt. Diese Bereiche sind überwiegend die Domänenwände. Erfahrungen zeigen [HUB98a], daß eine Elementlänge im Bereich der Austauschlänge erforderlich ist, um einen Diskretisierungsfehler von wenigen Prozent zu erhalten. Da die Domänenwände jedoch meist nur einen Bruchteil des Modells einnehmen, bedeutet dies eine starke Überdiskretisierung der Domänen selbst. Durch die Verwendung der FFT bei der Streufeldberechnung läßt sich, trotz der höheren Anzahl von Elementen, die Rechengeschwindigkeit erhöhen. Das im folgenden vorgeschlagene, eigens entwickelte Mehrfachgitterverfahren bedient sich einer speziellen Methodik, um ein grobes Gitter für Bereiche geringer Diskretisierungsanforderung mit feinen Gittern in Bereiche hoher Diskretisierungsanforderung zu koppeln. Diese Methodik ist so gewählt, daß weiterhin die FFT verwendet werden kann. Die Mehrfachgittermethode beschränkt sich in der hier entwickelten Form ausschließlich auf zweidimensionale Rechnungen und der Verwendung eines einzelnen Gitters. Die Zweidimensionalität bedeutet, daß die Ortskoordinate der

Magnetisierungen nur zwei Dimensionen besitzt, wohingegen Magnetisierungskomponenten nach wie vor drei Raumrichtungen aufweisen können. Eine Erweiterung der Methode auf drei Dimensionen und einer Vielzahl unterschiedlich fein diskretisierter Gitter ist möglich. In den gezeigten Beispielen, die dazu dienen die Effizienz und die Genauigkeit der Methodik zu verifizieren, wird ein grobes Gitter verwendet, welches das gesamte zu berechnende Gebiet abdeckt und ein feines Gitter, welches einen ausgezeichneten Bereich überlappt. Bild 5.9 zeigt ein solches Mehrfachgitter.

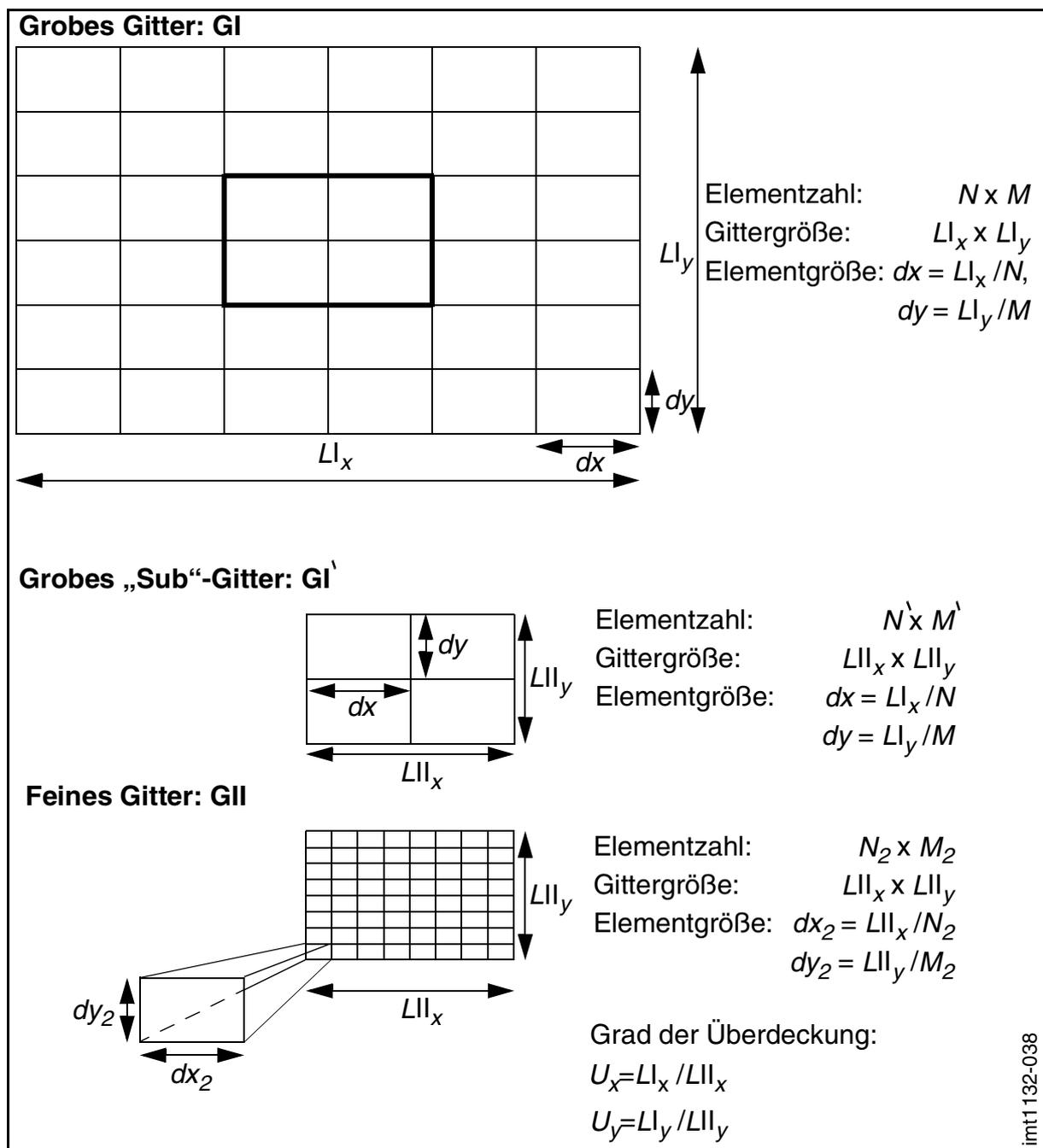


Bild 5.9: Darstellung der Mehrfachgitter und ihrer Größen

Das gesamte grobe Netz wird gekennzeichnet durch „I“ und der ausgezeichnete Bereich für die Verfeinerung mit „I'“. Das feine Netz, welches in den Bereich von „I'“ paßt, wird durch „II“ gekennzeichnet.

5.5.1 Streufeldenergie eines Mehrfachgitters

Wie im vorausgehenden Abschnitt dargestellt, ist die Besonderheit der Mehrfachgittermethode die Verwendung der FFT auf unterschiedlich fein diskretisierten, regelmäßigen Gittern. Diese Eigenschaft unterscheidet das Verfahren von klassischen adaptiven Verfahren, da bei diesen die Möglichkeit der Verwendung der FFT bei der Berechnung der Streufeldenergie nicht gegeben ist. Damit die durch die FFT errechneten magnetischen Potentiale der unterschiedlichen Gitter miteinander verknüpft werden können, bedarf es einer Vorgehensweise, die im folgenden an zwei unterschiedlichen Verfahren vorgestellt werden soll. Diese unterscheiden sich deutlich in ihrem Ansatz. Das erste Verfahren besitzt eine einfache Struktur und bedient sich weniger Berechnungsschritte, wohingegen das zweite Verfahren einen komplexeren Berechnungsansatz erfordert. Die Bewertung und Gegenüberstellung zeigt die Notwendigkeit des zweiten Verfahrens allerdings erst bei der Berechnung einer speziell ausgewählten Magnetisierungskonfiguration. Bevor die einzelnen Verfahren im Detail beschrieben werden, ist es erforderlich, die hierbei verwendeten Größen zu definieren. Grundlage ist die in Kapitel 2.1.1 bereits vorgestellte Gleichung zur Berechnung der Streufeldenergie aus dem magnetischen Potential $\Phi_d(\mathbf{r})$ und der magnetischen Ladungsverteilung im Volumen $\lambda_V(\mathbf{r})$ und an der Oberfläche $\sigma_S(\mathbf{r})$:

$$E_d = J_s \left[\int \lambda_V(\mathbf{r}) \Phi_d(\mathbf{r}) dV + \int \sigma_S(\mathbf{r}) \Phi_d(\mathbf{r}) dS \right] \quad (5.1)$$

Hieraus folgt für die Ladungsverteilung des Volumens und der Oberflächen:

$$\lambda_V = -\text{div } \mathbf{m}, \quad \sigma_S = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} \quad (5.2)$$

Das magnetische Potential läßt sich aus diesen Größen bilden zu:

$$\Phi_d = \frac{J_s}{4\pi\mu_0} \left[\int \frac{\lambda_V(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' + \int \frac{\sigma_S(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dS' \right] \quad (5.3)$$

Für eine Finite-Elemente Anwendung läßt sich Gleichung 5.3 unter Verwendung

von Wichtungsfunktionen und unter Vernachlässigung der Indizes diskretisiert formulieren:

$$\Phi = \lambda \otimes W \quad (5.4)$$

Die Größen für die Ladungsverteilung und das magnetische Potential können nun getrennt und gekoppelt für die unterschiedlichen Gitter aufgestellt werden. Die Indizes „I“, „I'“ und „II“ entsprechen den Gittern aus Bild 5.9. Somit kann folgendes definiert werden:

$\lambda_I, \lambda_{I'}, \lambda_{II}$: Ladungsverteilungen des groben Gitters „I“, des groben „Sub“-Gitters „I'“ und des feinen Gitters „II“.

$\lambda_{(I-I')} = \lambda_I - \lambda_{I'}$: Ladungsverteilung des groben Gitters, ohne den Bereich des groben „Sub“-Gitters.

$\bar{\lambda}_{II}$: Mittelung von λ_{II} auf „I'“.

$\hat{\lambda}_I = \lambda_{(I-I')} + \bar{\lambda}_{II}$: Ladungsverteilung des groben Gitters mit der gemittelten Ladungsverteilung vom feinen Gitter im Bereich des groben „Sub“-Gitters.

$\hat{\lambda}_{II} = \lambda_{II} - \lambda_{I'}$: Ladungsverteilung des feinen Gitters abzüglich der Ladungsverteilung des groben „Sub“-Gitters.

Die magnetischen Potentiale ergeben sich zu:

$$\Phi_I = \lambda_I \otimes W_I, \Phi_{II} = \lambda_{II} \otimes W_{II}, \Phi_{I'} = \lambda_{I'} \otimes W_{I'},$$

$$\Phi_I = \hat{\lambda}_I \otimes W_I, \Phi_{II} = \hat{\lambda}_{II} \otimes W_{II}.$$

Mit diesen Definitionen werden die zwei Verfahren zur Streufeldenergieberechnung wie folgt definiert:

Variante 1

Der erste Ansatz besteht darin, die Energie des groben und des feinen Gitters getrennt in konventioneller Weise zu berechnen. Weiterhin kann unabhängig vonein-

ander die Streufeldenergie der beiden Gitter bestimmt werden. Allerdings wird bei einer Addition der Energien beider Gitter die Wechselwirkung des „Sub“-Gitters doppelt berechnet. Aus diesem Grund ist es erforderlich, diesen Anteil anschließend zu subtrahieren. Dies führt zu der folgenden Gleichung für Variante 1:

$$E_d = \lambda_I \cdot \Phi_I + \lambda_{II} \cdot \Phi_{II} - \lambda_I \cdot \Phi_I \quad (5.5)$$

Variante 2

Variante 1 hat einen entscheidenden Nachteil, der in Kapitel 5.5.3 noch genauer untersucht wird. So ist es möglich, daß in dem Bereich des feinen Gitters Strukturen vorkommen, die erst bei der höheren Auflösung der Magnetisierungsverteilung durch das feine Gitter zum Vorschein kommen. Falls diese feinen Strukturen die Eigenschaft besitzen die Energie des Systems zu reduzieren, kann es zu Ungenauigkeiten in Gleichung 5.5 kommen. Dieser Nachteil wird durch Variante 2 behoben. Hierzu wird bei der Berechnung des Potentials und der Energie des groben und des „Sub“-Gitters die gemittelte Ladungsverteilung des feinen Gitters verwendet. Dies führt zu folgender Gleichung:

$$E_d = \hat{\lambda}_I \cdot \Phi_I + \lambda_{II} \cdot \Phi_{II} - \lambda_I \cdot \Phi_I \quad (5.6)$$

5.5.2 Definition einer Testfunktion

Um die Effizienz der Mehrfachgittermethode zuverlässig beurteilen zu können, soll eine Testfunktion definiert werden. Diese Funktion ist einem realen mikromagnetischen Verhalten nachempfunden. Es handelt sich hierbei um eine lokal begrenzte, streufeldfreie Konfiguration, mit dem magnetisches Vektorpotential:

$$A(x, y) = a \cdot e^{(-bx^2)} \cdot \cos\left(\pi \cdot \frac{x}{L}\right) \cdot \cos\left(\pi \cdot \frac{y}{D}\right) \quad (5.7)$$

Hieraus resultiert für die Komponenten der Magnetisierung:

$$m_x = d \frac{A}{dy}, \quad m_y = -d \frac{A}{dx}, \quad m_z = \sqrt{(1 - m_x^2 - m_y^2)} \quad (5.8)$$

In einer Darstellung der Magnetisierungen ([Bild 5.10](#)) erkennt man, daß die

gewählte Teststruktur einem Wirbel ähnelt. Dies ist auch der Grund dafür, daß die Teststruktur streufeldfrei ist. Da es sich um eine zweidimensionale Simulation handelt, werden Ladungen aufgrund einer Divergenz in z-Richtung nicht berücksichtigt.

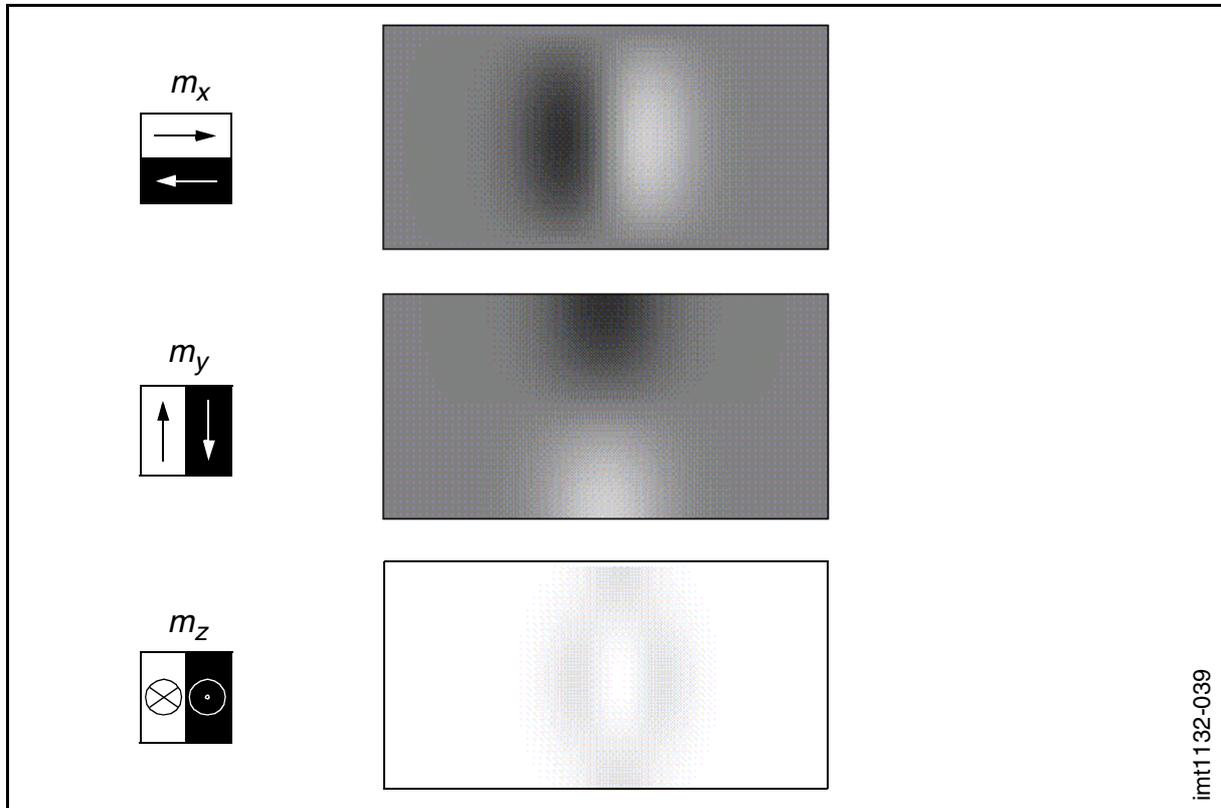


Bild 5.10: Komponenten der Magnetisierung der streufeldfreien Testkonfiguration

Eine Vektordarstellung der Magnetisierungsverteilung und eine Darstellung der skalaren Ladungsverteilung zeigt [Bild 5.11](#).

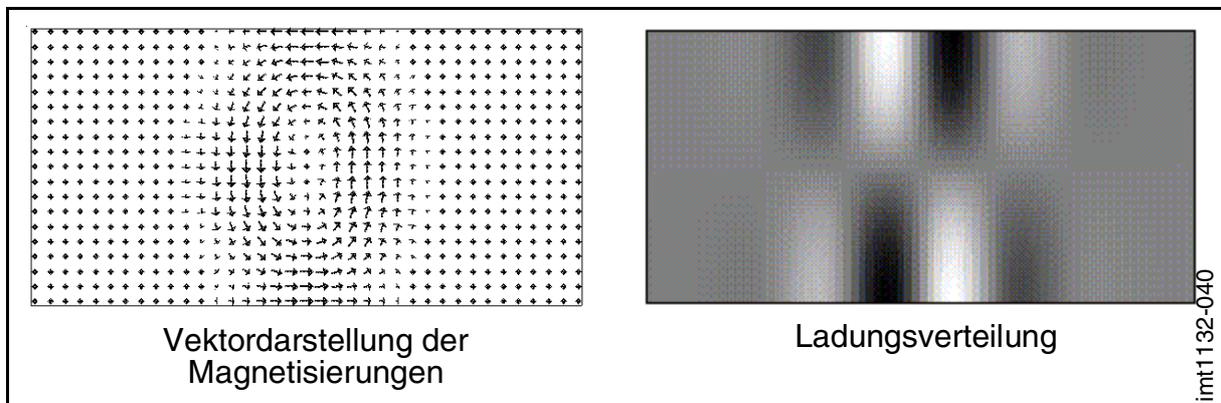


Bild 5.11: Magnetisierungs- und Ladungsverteilung der streufeldfreien Testfunktion

Da eine solche Struktur aufgrund der Streufeldfreiheit keine Streufeldenergie besitzt, jedoch das Ziel die Berechnung und der Vergleich der Streufeldenergie ist, wird bei der Konfiguration nur eine Hälfte, und zwar der Bereich oberhalb der X-Achsen-symmetrie, verwendet. Die weiterhin vorhandene Symmetrie bezüglich der Y-Achse ist vorteilhaft, da jede künstliche Asymmetrie, hervorgerufen durch ungünstige Wahl des Mehrfachgitters, zu einem Anstieg der Energie führt. Um die folgenden Rechnungen vergleichen zu können, ist es erforderlich, die genaue Energie der gewählten Testkonfiguration zu kennen. Hierzu wird mit dem Standardverfahren mit zunehmender Diskretisierung die Streufeldenergie berechnet und über die Anzahl der Elemente aufgetragen (Bild 5.12). Man erkennt, daß sich die Energie einem Maximum nähert.

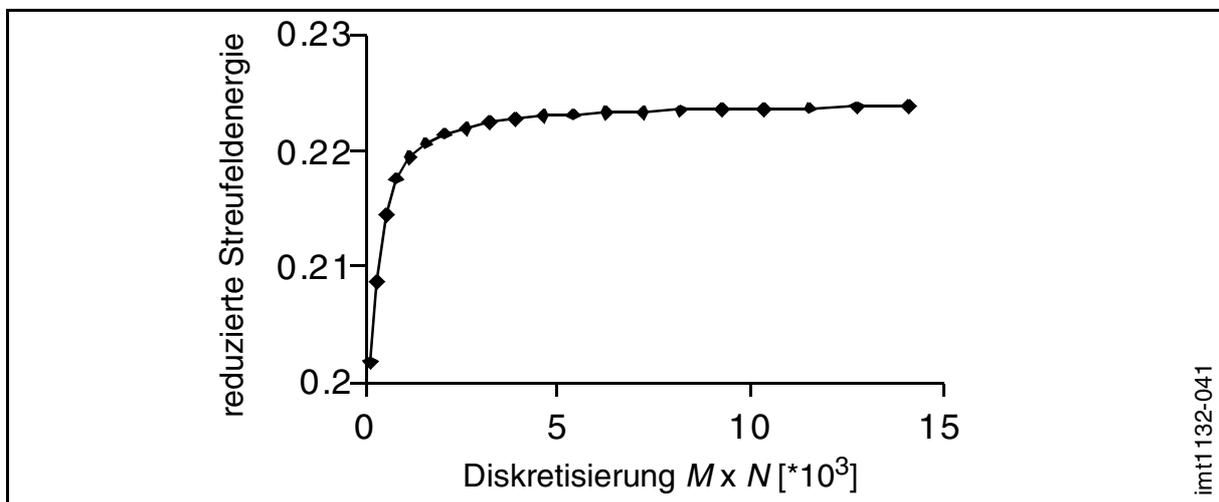


Bild 5.12: Streufeldenergie in Abhängigkeit der Diskretisierung

Trägt man nun die Energie über den Kehrwert der Elementzahl auf, so nimmt der Graf annähernd die Form einer Gerade an (Bild 5.13) und man kann die Energie bei unendlicher Diskretisierung extrapolieren. Dies führt zu einer Streufeldenergie von 0.2242 Austauschlängen ($\sqrt{A/K_d}$), bei einer Wahl der Parameter a , b , L und D , wie in Tabelle 5.1 dargestellt.

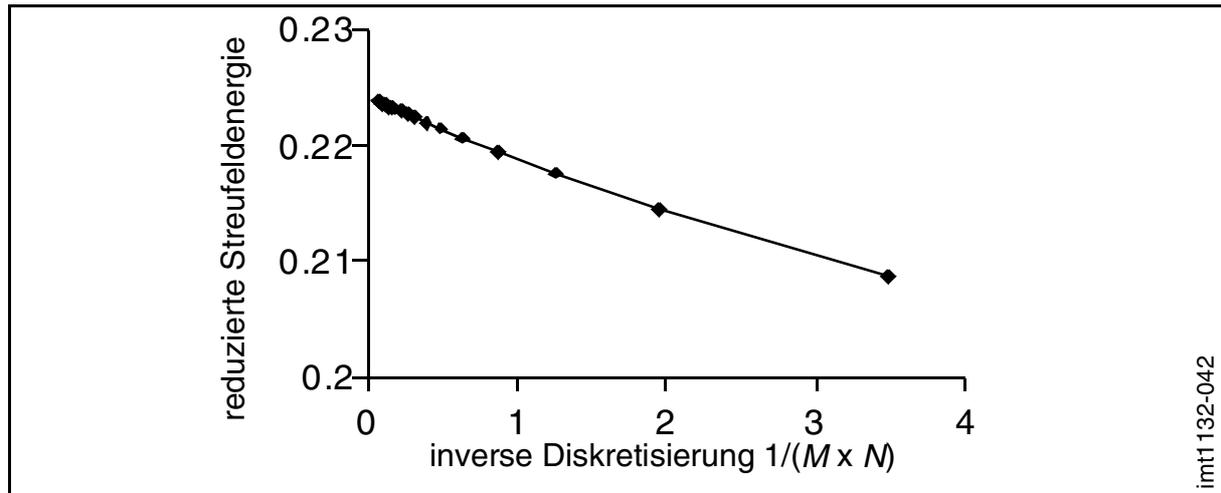


Bild 5.13: Streufeldenergie in Abhängigkeit der inversen Diskretisierung

Streufeldenergie E_d ($\sqrt{A/K_d}$)	Länge L ($\sqrt{A/K_d}$)	Breite D ($\sqrt{A/K_d}$)	Parameter a	Parameter b
0.2242	20	10	1.0	0.5

Tabelle 5.1: Streufeldenergie und Parameter der Testfunktion

5.5.3 Vergleich und Bewertung der Verfahren

Um das Mehrfachgitter zu beschreiben, müssen weitere Größen eingeführt werden. Diese sind die Lage des feinen Gitters innerhalb des groben Gitters, der Überdeckungsgrad und die Diskretisierung (siehe [Bild 5.9](#)). Weiterhin läßt sich die Lage der Teststruktur innerhalb der Gitter positionieren. Beim Vergleich der Verfahren wird mit dem Fall begonnen, bei dem die Teststruktur exakt symmetrisch im Zentrum der Gitter liegt und auch das „Sub-Gitter“ exakt zentriert ausgerichtet ist. Aussagekräftig ist hierbei, wie der Grad der Diskretisierung von der Energie abhängt. Da dieser für das grobe Gitter und das feine Gitter unterschiedlich gewählt werden kann, werden zum Vergleich der Ergebnisse der Bedarf an Speicher und die CPU-Zeit beurteilt. Dieser steht in einem eindeutigen Verhältnis zu der Gesamtzahl der Elemente. Weiterhin sind diese Größen für den Benutzer von entscheidender Bedeutung. In [Bild 5.14](#) und [Bild 5.15](#) sind die Ergebnisse für den Fall eines Überdeckungsgrades von 50%, d.h. das feine Gitter nimmt 50% der Fläche des groben Gitters ein, dargestellt. Die Über-

deckung in Y-Richtung beträgt immer 100%, um die Aussagen zu vereinfachen. Die Energien sind genormt und beziehen sich auf die in Kapitel 5.5.2 berechnete Streufeldenergie bei unendlicher Diskretisierung.

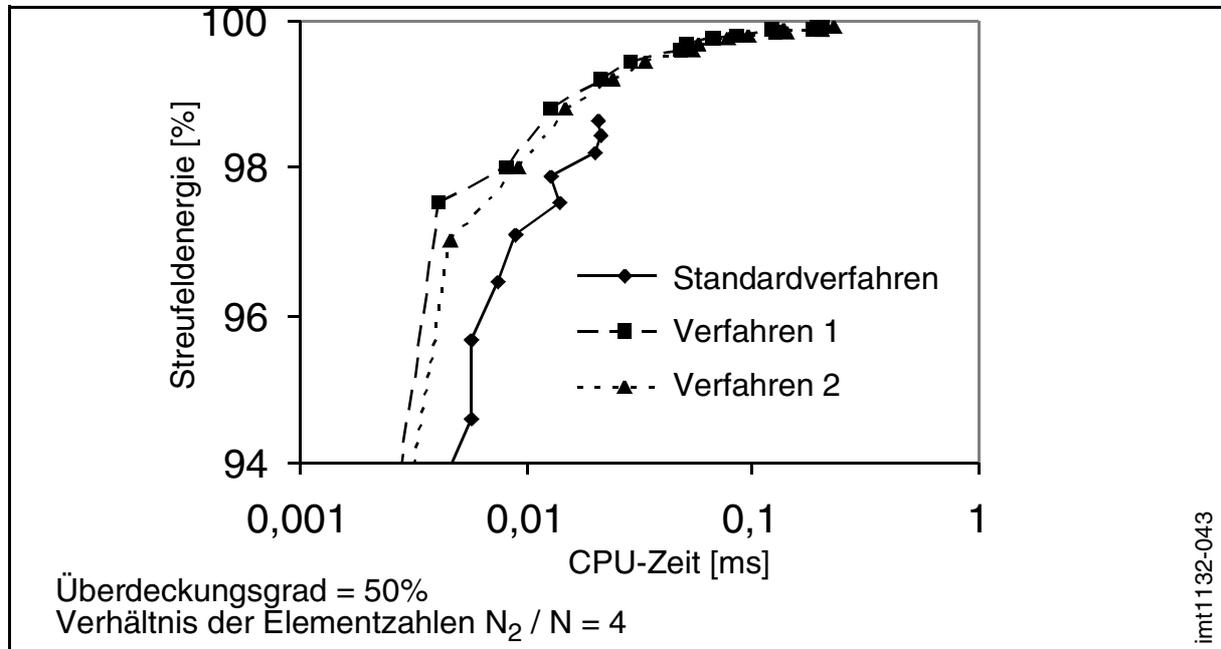


Bild 5.14: CPU-Zeiten für einen Überdeckungsgrad von 50% und 4-fache Diskretisierung des Mehrfachgitters

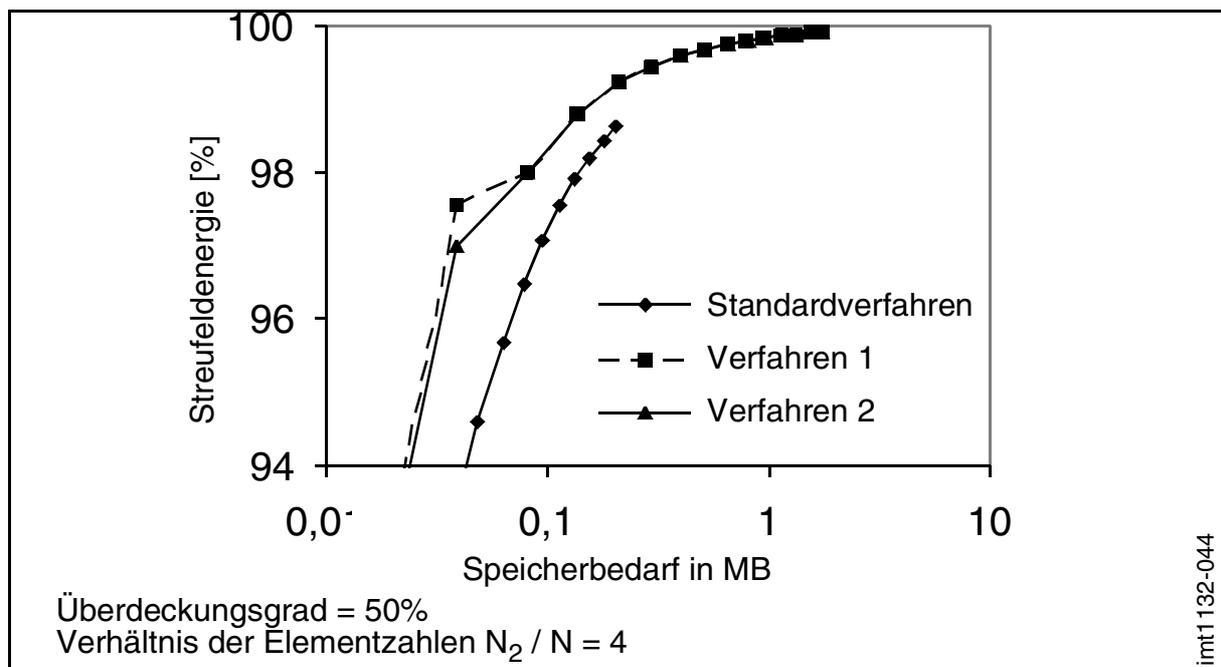


Bild 5.15: Speicherbedarf für einen Überdeckungsgrad von 50% und 4-fache Diskretisierung des Mehrfachgitters

Man erkennt, daß bereits bei diesem hohen Überdeckungsgrad das Mehrfachgitterverfahren eindeutige Vorteile gegenüber dem Standardverfahren besitzt. Die beiden Varianten haben ein fast deckungsgleiches Verhalten, welches wesentlich früher als das Standardverfahren hohe Genauigkeiten erzielt. Ebenso ist zu erkennen, daß der Verlauf der verwendeten CPU-Zeit der Charakteristik des benötigten Speicherbedarfs ähnelt. Die Ungenauigkeit der Ergebnisse bei der Berechnung der CPU-Zeit hat zwei Ursachen. Zum einen sind die Rechnungen leicht abhängig von der momentanen Belastung des verwendeten Rechners und zum anderen besitzt die FFT unterschiedliche Rechengeschwindigkeiten in Abhängigkeit der Vektorlängen. So ist es vorteilhaft, wenn sich die Vektorlänge als ein Vielfaches von zwei ausdrücken läßt. Aus diesem Grund wird im folgenden auf die Darstellung der CPU-Zeit verzichtet und nur der Speicherbedarf als Kriterium verwendet.

Wie man weiterhin den Ergebnissen in [Bild 5.14](#) entnehmen kann, besitzt die Variante 1 gegenüber der Variante 2 leichte Vorteile. Dies liegt in dem Mehraufwand der Variante 2 durch den Prozeß der Mittelung der Ladungen des feinen Gitters. Um die Vorteile des Verfahrens 2 eindeutig herauszustellen, muß ein Sonderfall betrachtet werden. Hier wird die Wahl der Teststruktur als streufeldfreie Konfiguration deutlich. So war bislang das grobe Gitter so angeordnet, daß die Teststruktur zentriert liegt. Jede Ladung rechts von der Y-Symmetrieachse besitzt einen Gegenpol auf der gegenüberliegenden Seite. Durch die symmetrische Lage der Teststruktur und des Gitters, treten bei der Berechnung daher auch keine Fehler auf. Wird nun die Teststruktur leicht verschoben, so führt dies dazu, daß das grobe Gitter die Symmetrie nicht erkennen kann und eine sehr hohe Energie berechnet wird. Das feine Gitter jedoch kann die Symmetrie auflösen und somit wird der hierdurch entstehende Fehler bei der Subtraktion der Energie des „Sub“-Gitters nicht beseitigt. [Bild 5.16](#) zeigt, daß dies ebenso für das Standardverfahren gilt. Der Fehler liegt bereits bei kleinen Verschiebungen, wie hier bei 0-10% der Modellgröße, bereits bei einigen hundert Prozent. Dieser hohe Fehler macht die Variante 1 nutzlos, da sie nun kaum noch Vorteile gegenüber dem Standardverfahren besitzt. Auch kann nicht davon ausgegangen werden, daß der Benutzer genug über die wirkliche Konfiguration des Systems kennt, um die Gitter günstig anzulegen. Das Verfahren 2 hingegen erkennt den berechneten Fehler eindeutig dadurch, daß die durch das feine Gitter aufgelöste Symmetrie durch die Mittelung auf das grobe Gitter übertragen wird. Dies bedeutet, daß die Lage des groben

Gitters nun unabhängig sein kann. Bild 5.16 kann man entnehmen, daß der Fehler äußerst gering ist. Erst diese Vorteile der Variante 2 machen die Verwendung eines Mehrfachgitters sinnvoll.

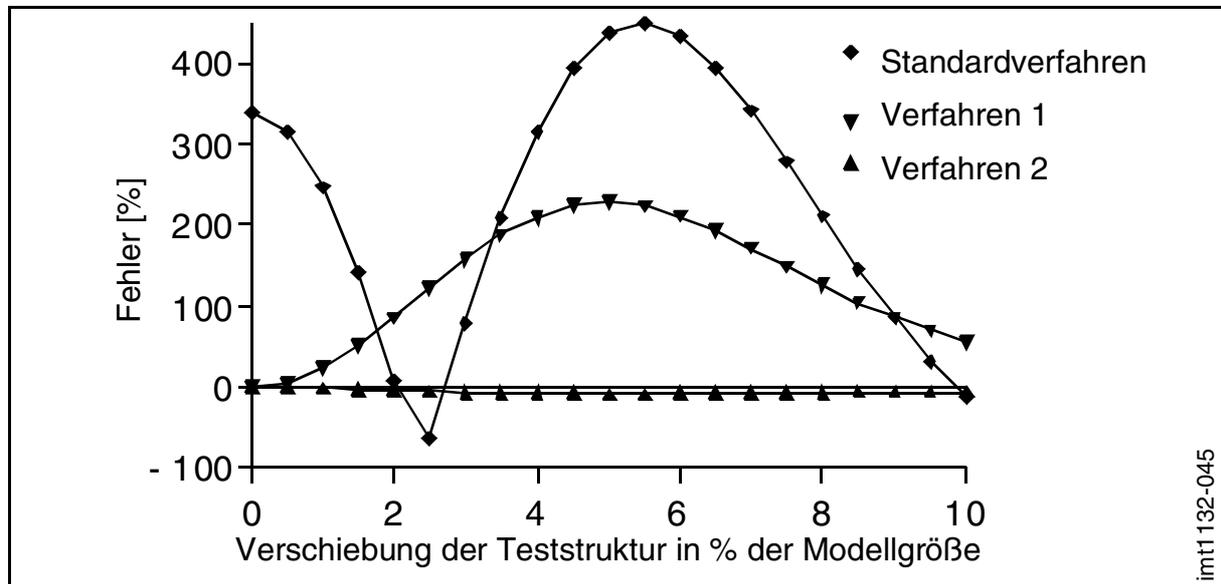


Bild 5.16: Vergleich der Verfahren bei Verschiebung der Teststruktur

Aufgrund der doch erheblichen, möglichen Ungenauigkeiten der Variante 1, fällt eine klare Entscheidung zu Gunsten Variante 2, mit der alle folgenden Berechnungen durchgeführt werden. Wichtig ist hierbei zu wissen, inwieweit der Grad der Überdeckung einen Einfluß auf die Genauigkeit und Effizienz des Verfahrens hat. Hierzu wurden mit unterschiedlichem Überdeckungsgrad Rechnungen durchgeführt. Bild 5.17 zeigt die Ergebnisse dieser Untersuchung. Man erkennt, daß die Effizienz mit sinkendem Überdeckungsgrad zunimmt, bis zu dem Punkt, wo die Größe des feinen Gitters die Grenzen der Wand erreicht. Hieraus folgt, daß möglichst kleine und feine Gitter zu verwenden sind, die vollständig den Bereich der Wände abdecken müssen. Hierzu muß offensichtlich die Lage der Wände ungefähr bekannt sein.

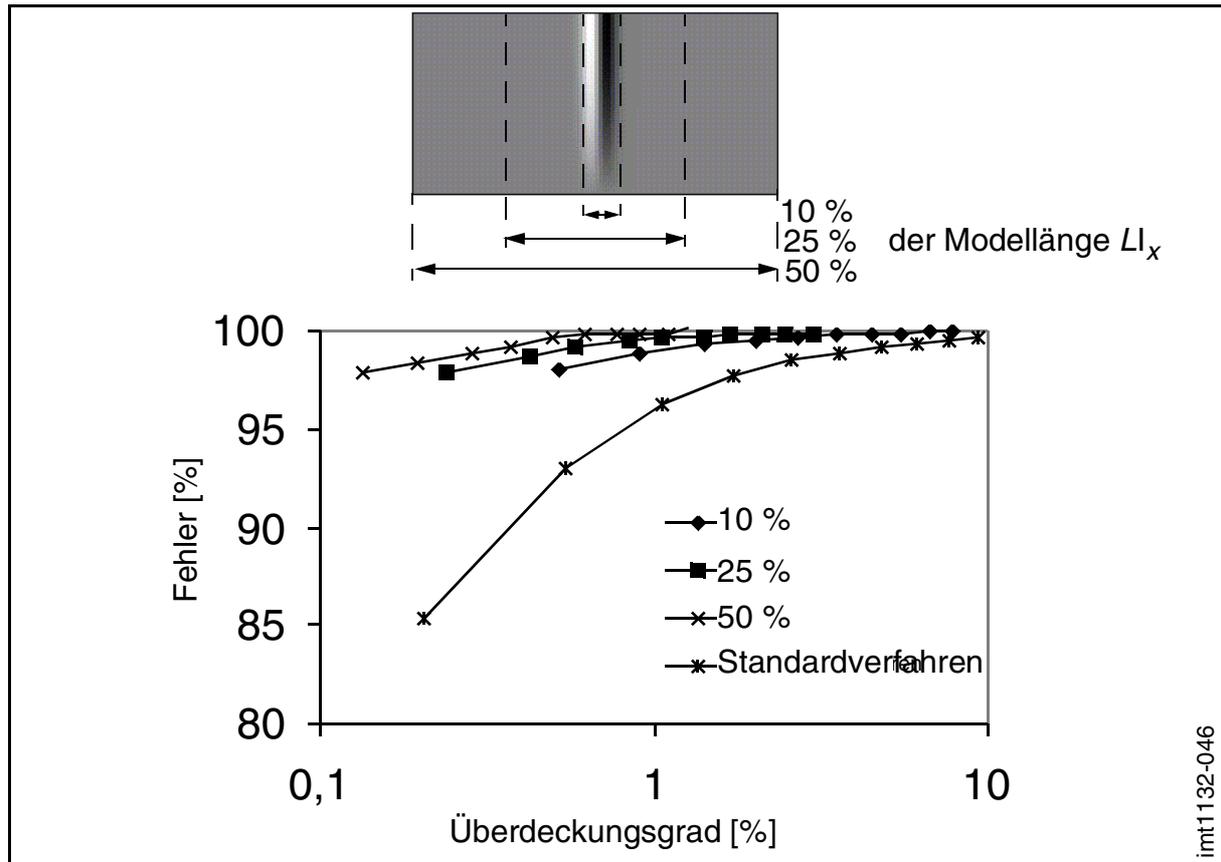


Bild 5.17: Effizienz in Abhängigkeit des Überdeckungsgrades für verschiedene Größen des „Sub-Gitters“

Die Effizienz hinsichtlich Genauigkeit, Rechengeschwindigkeit und auch Speicherbedarf konnten für das Mehrfachgitterverfahren eindeutig nachgewiesen werden. Die Verwendung eines Prozesses der Ladungsmittelung zwischen dem groben und dem feinen Gitter ermöglichte es, potentielle Fehler zu vermeiden. In dieser Arbeit beschränkte sich die Mehrfachgittermethode auf die Koexistenz von nur einem groben und einem feinen Gitter. Aus diesem Grund konnte auch nur eine Wand aufgelöst werden. Das Verfahren läßt sich auf mehrere feine Gitter abstimmen. Ebenso ein iterativer Prozeß, wo die Lage und der Grad der Diskretisierung des feinen Gitters sich der Lage möglicher Wände anpassen kann, ist denkbar, wird aber im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter verfolgt. Diese Kombination aus nicht einheitlich diskretisierten Gittern und der Verwendung der FFT läßt erwarten, daß mit Hilfe dieser Methode auch größere Modelle gerechnet werden können, deren Untersuchung bislang durch begrenzten Speicherraum und Rechnerzeit unmöglich waren.

6 Simulation dünner Schichtstrukturen

Im folgenden werden numerische, dreidimensionale mikromagnetische Untersuchungen an dünnen Schichtstrukturen vorgestellt. Hierbei werden zwei Varianten untersucht, die sich in der Geometrie unterscheiden, aber gleiche Materialeigenschaften besitzen (Bild 6.1).

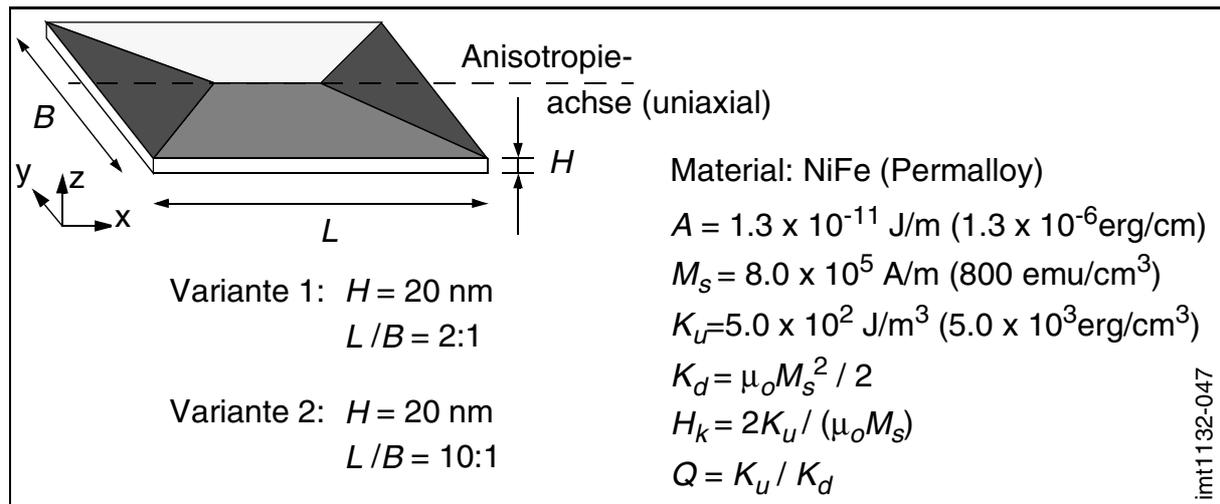


Bild 6.1: Materialeigenschaften und Geometrie der Varianten 1 und 2

Bei dem Material handelt es sich um Permalloy, bei dem eine uniaxiale Anisotropie entlang der langen Achse der Schichtstruktur angenommen wird. Die Schichtdicke beträgt in beiden Beispielen 20 nm. Die Abmessungen der Länge und Breite sind variabel, jedoch unterliegen sie einem festen Verhältnis L/B , welches bei Variante 1 zu 2:1 und bei Variante 2 zu 10:1 gesetzt ist. Die erste Variante findet ihren Ursprung in einem Benchmarkproblem, welches von der NIST (National Institute for Standards and Technology) [NIS98] vorgeschlagen wurde, um Ergebnisse von mikromagnetischen Simulationen miteinander vergleichen zu können. Die zweite Variante besitzt eine Geometrie, die ihren Einsatz in der magnetischen Sensortechnologie, insbesondere in magnetoresistiven Sensoren, findet. Hier werden dünne Schichten mit hoher Formanisotropie benötigt, um möglichst eine Ausrichtung der Magnetisierungen entlang der langen Achse zu erreichen. Dies ist erforderlich, um ein optimales und hochsensibles Verhalten des Sensors zu ermöglichen. Diese starke Formanisotropie läßt sich durch ein hohes Aspektverhältnis von Länge zu Breite erreichen. Für die Variante 2 wurde daher das Verhältnis von 10:1 gewählt. An diesen beiden Beispielen

werden zunächst die metastabilen Zustände untersucht, die ohne Erregung durch ein externes Feld auftreten. Ausgehend von den hierbei gewonnenen Erkenntnissen werden diese Stabilitätsuntersuchungen in Abhängigkeit der Länge des Systems durchgeführt. Im Anschluß werden Untersuchungen bei einem anliegenden Feld vorgenommen. Hierbei werden Schaltprozesse, aber auch Strukturwechsel aufgezeigt und untersucht. Aus den dabei gewonnenen Ergebnissen, können die Hystereseeigenschaften der Schichten vorhergesagt werden. Um den Bezug zur magnetischen Sensortechnologie zu erhalten, werden abschließend die magnetoresistiven Eigenschaften der betrachteten Schichten untersucht und gegenübergestellt.

6.1 Vorgehensweise

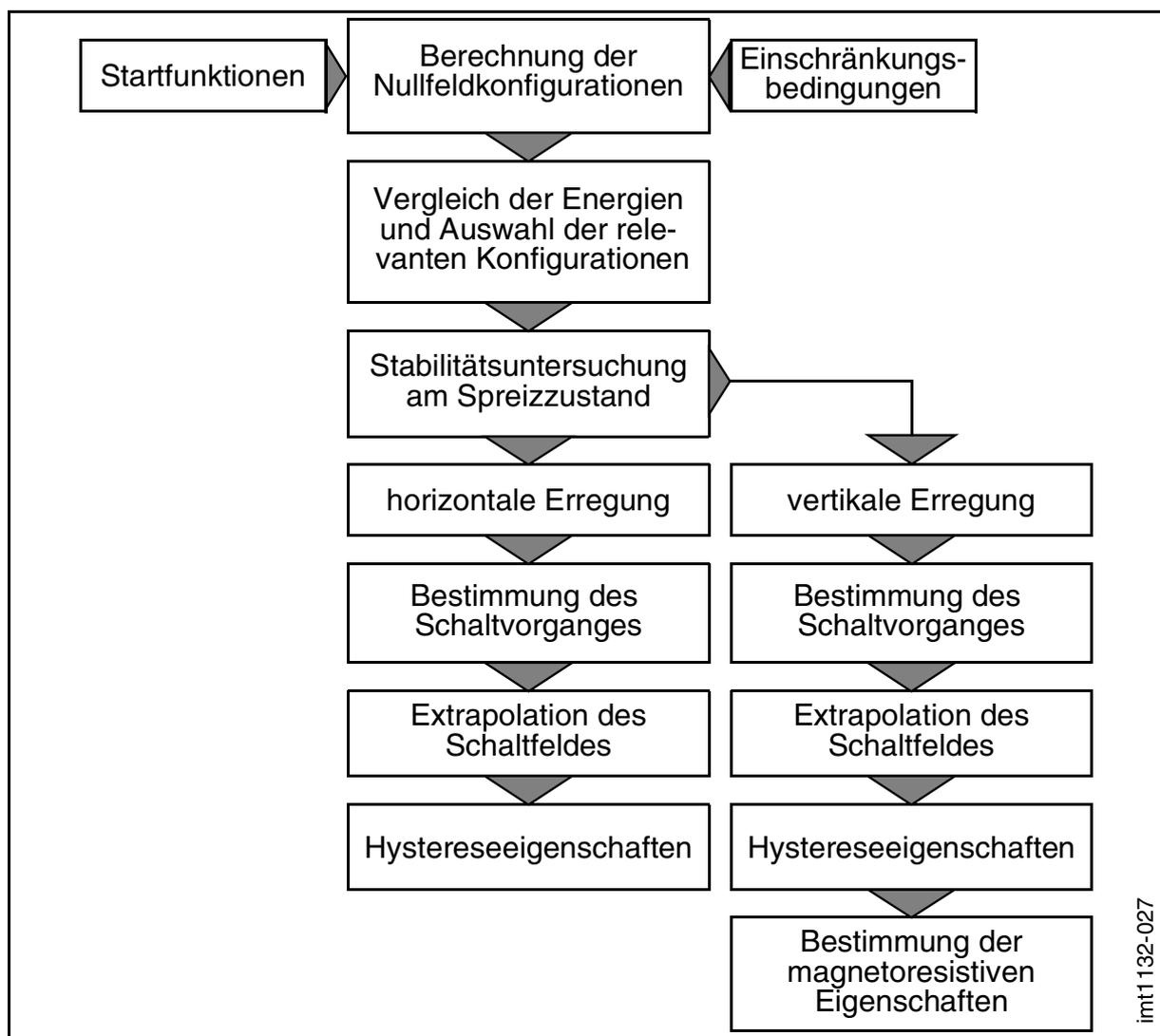


Bild 6.2: Simulation dünner Schichtstrukturen

Bild 6.2 zeigt die Vorgehensweise für die Simulation dünner Schichtstrukturen.

Ausgangspunkt ist die Berechnung der Nullfeldkonfigurationen, also der Zustände, die sich einstellen, falls kein externes Feld anliegt. Dies geschieht unter Berücksichtigung von Startfunktionen und eigens entwickelten Einschränkungsbedingungen. Anschließend werden die Energien verglichen, wodurch längenabhängige Stabilitätsaussagen gemacht werden können. Die für die folgende Bestimmung des Schaltvorganges wichtige Stabilitätsuntersuchung am Spreizzustand muß durchgeführt werden. Ausgehend von den bisherigen Ergebnissen kann das System durch ein externes Feld erregt werden, um die Hystereseigenschaften zu bestimmen. Die Erregung kann horizontal, aber auch vertikal erfolgen. In beiden Fällen ist die Bestimmung des Schaltvorganges erforderlich. Mit den hierbei gewonnen Erkenntnissen, kann das Schaltfeld extrapoliert werden. Weitere Maßnahmen sind die Berechnung der Hystereseigenschaften. Für den Fall der vertikalen Erregung werden zusätzlich die magnetoresistiven Eigenschaften bestimmt.

6.2 Magnetische Grundkonfigurationen ohne externe Erregung

Da bei mikromagnetischen Problemen die Lösung nicht eindeutig ist, sondern mehrere metastabile Lösungen existieren, ist es erforderlich, möglichst viele zu ermitteln. Erst dann können Aussagen über das Verhalten des Systems getroffen werden. Würde man sich auf die Lösung von nur einem oder wenigen metastabilen Zuständen beschränken, könnte man den wahrscheinlichsten Stabilitätszustand, also den Grundzustand, übersehen. Ein Vergleich der relevantesten metastabilen Zustände untereinander läßt die Stabilität ausreichend in ihrer Bedeutung für das System beurteilen. Durch Vergleich der Energien ist es ferner möglich den Grundzustand zu finden, der sich ja dadurch auszeichnet, daß er der Zustand mit der geringsten Energie ist. Ob das reale System einen der metastabilen Zustände oder den Grundzustand einnimmt, hängt von der Vorgeschichte ab. So ist es beispielsweise nicht zwingend, daß sich der Grundzustand einstellt. Um numerisch metastabile Zustände zu finden, bedarf es eines systematischen Vorgehens.

6.2.1 Vorgehensweise

Da die Simulation von metastabilen Zuständen eine hohe Anforderung an den Benutzer stellt, soll die Vorgehensweise hier erläutert werden. Grundsätzlich ist festzustellen, daß die metastabilen Zustände oft sehr nahe beieinander liegen können

[RAM97]. Dies bedeutet, daß bereits ein numerisches Rauschen dazu führen kann, daß während der Simulation Konfigurationen gewechselt werden. Außerdem ist es für den Fall einer schwach ausgeprägten Stabilität möglich, daß sich während der Simulation Strukturen bewegen oder sogar oszillieren und somit die Anzahl der Iterationen extrem in die Höhe getrieben wird, ohne daß es zu einer eindeutigen Lösung kommt. Ein Beispiel hierfür ist das Wandern des Zentrums eines Stachels. Unter Umständen kann das Wandern sogar dazu führen, daß die Lösung nicht konvergiert. Um dennoch eine eindeutige Lösung zu erhalten, ist es nötig, apriori mögliche Konfigurationen zu kennen, um dann diese gezielt zu berechnen. Sind diese möglichen Konfigurationen bekannt, kann durch die Wahl einer geeigneten Startfunktion und vor allem durch die Wahl von Einschränkungsbedingungen die Lösungsfindung beschleunigt und zum Teil auch erst ermöglicht werden. Die Startkonfigurationen geben die Verteilung der Magnetisierung vor, mit welcher die Simulation beginnt. Dies ermöglicht, die Zahl der Iterationen deutlich zu verringern und reduziert die Wahrscheinlichkeit des unerwünschten Überganges der Magnetisierungen in eine energetisch benachbarte, metastabile Konfiguration. Die Startkonfiguration läßt sich zudem als der reale Ausgangszustand verstehen, was gleichbedeutend ist mit dem Endzustand einer Vorgeschichte. Ein Beispiel einer Startfunktion für die Simulation einer C-Konfiguration für die Variante 1 zeigt [Bild 6.3](#). Die Startfunktion ist in [Bild 6.3a](#) dargestellt.

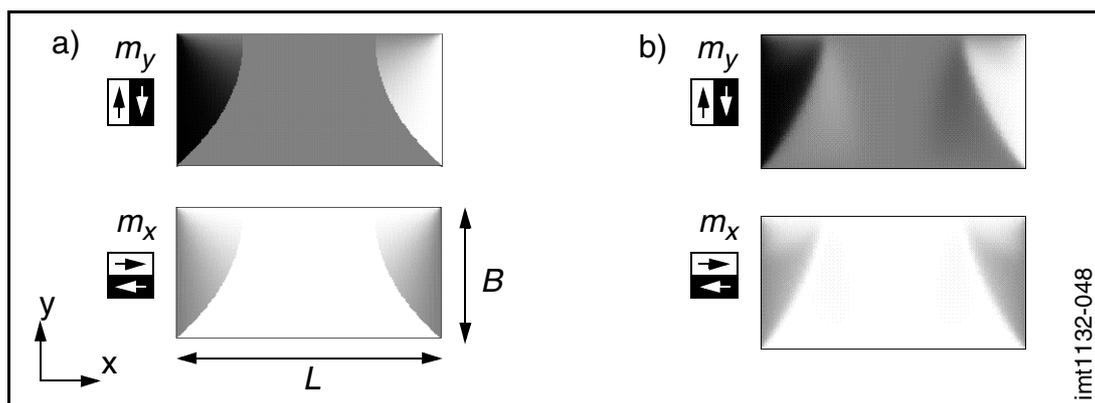


Bild 6.3: Startfunktion a) und Endzustand nach der Simulation b) eines C-Zustandes (Variante 1)

Man erkennt, daß die Struktur noch sprunghafte Übergänge aufweist. Die C-Struktur wird aber bereits vor der wirklichen Simulation sichtbar. Die mathematische Formulierung der Startfunktionen entspricht zum Teil einer Domänentheorie von

Hubert [HUB98a], welche eine Annäherung von einfachen Konfigurationen mittels weniger Variablen ermöglicht. Der Fehler, der bei dieser einfachen Annäherung entsteht, beträgt zum Teil nur 10%. Dies bedeutet, daß die Relaxation durch die mikromagnetische Simulation ausschließlich dazu dient, diesen Fehler zu beseitigen. In solchen Fällen ist die Anzahl der Iterationen extrem gering. Jedoch beschränken sich diese Startfunktionen auf Fälle ohne Erregung durch ein externes Feld. Wirkt ein externes Feld, so kann die Startfunktion nicht in dieser gewünschten Form vordefiniert werden, was unweigerlich zu höheren Iterationszahlen führt. Die Simulation verlangsamt sich hierdurch deutlich, führt aber auch bei schwachen Stabilitäten durch die Wahl geeigneter Einschränkungsbedingungen zum Ziel. Das endgültige Ergebnis der mikromagnetischen Simulation der C-Konfiguration ist in Bild 6.3b zu erkennen. Hier wird deutlich, daß sich die Struktur leicht verändert hat. Die dargestellte Konfiguration zeigt das Energieminimum dieser metastabilen C-Konfiguration. Weitere Konfigurationen sind möglich, müssen aber unabhängig voneinander mit entsprechender Startfunktion berechnet werden. Da nicht immer verhindert werden kann, daß ausschließlich durch die Verwendung einer Startfunktion die Magnetisierungen in ein benachbartes Energieminimum springen, kann es erforderlich sein, zudem Einschränkungsbedingungen zu definieren. Dies bedeutet, daß ausgewählte Magnetisierungen in ihrer Richtung festgehalten, also in ihrer Bewegung eingeschränkt werden. Hiermit kann, wie bereits erwähnt, das Wandern des Zentrums eines Stachels durch Festhalten des Vektors im Zentrum des Stachels verhindert werden. Bei einer Stachelstruktur heißt dies, daß die Z-Komponente zu Eins und die X- und Y-Komponenten zu Null gesetzt werden. Bild 6.4 zeigt eine Vektordarstellung der Magnetisierungsverteilung einer Stachelstruktur für die Variante 1 und die festgehaltene Magnetisierung im Zentrum des Stachels. Es ist allerdings nicht immer gewährleistet, daß alle Zentren von Stacheln oder Wirbeln mit einer diskretisierten Magnetisierung zusammenfallen. Aus diesem Grund wird vor Beginn der Berechnungen die Diskretisierung so angepaßt, daß alle Zentren von Stacheln und Wirbeln mit diskretisierten Magnetisierungen übereinstimmen.

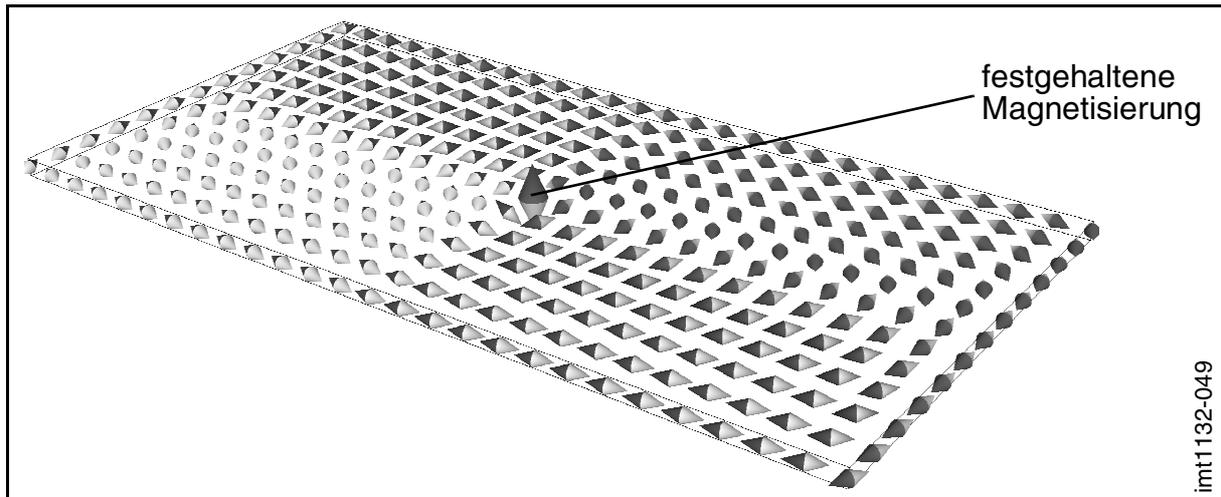


Bild 6.4: Einschränkungsbefingung bei einem Wirbel

Eine weitere Einschränkungsbefingung ist das Festhalten von Vektoren entlang von Symmetrieachsen, wie z.B. beim Sprezzustand (**Bild 6.5**). Hierdurch wird ein Umklappen in die benachbarten Zustände verhindert, in diesem Fall in die S- und C-Konfigurationen, bei denen diese Symmetrie gebrochen wird. Diese Einschränkungsbefingung ist besonders wichtig, da durch die künstliche Symmetrisierung, wie später noch gezeigt wird, ein Sprezzustand erzwungen und somit die Stabilität der Symmetrie untersucht werden kann.

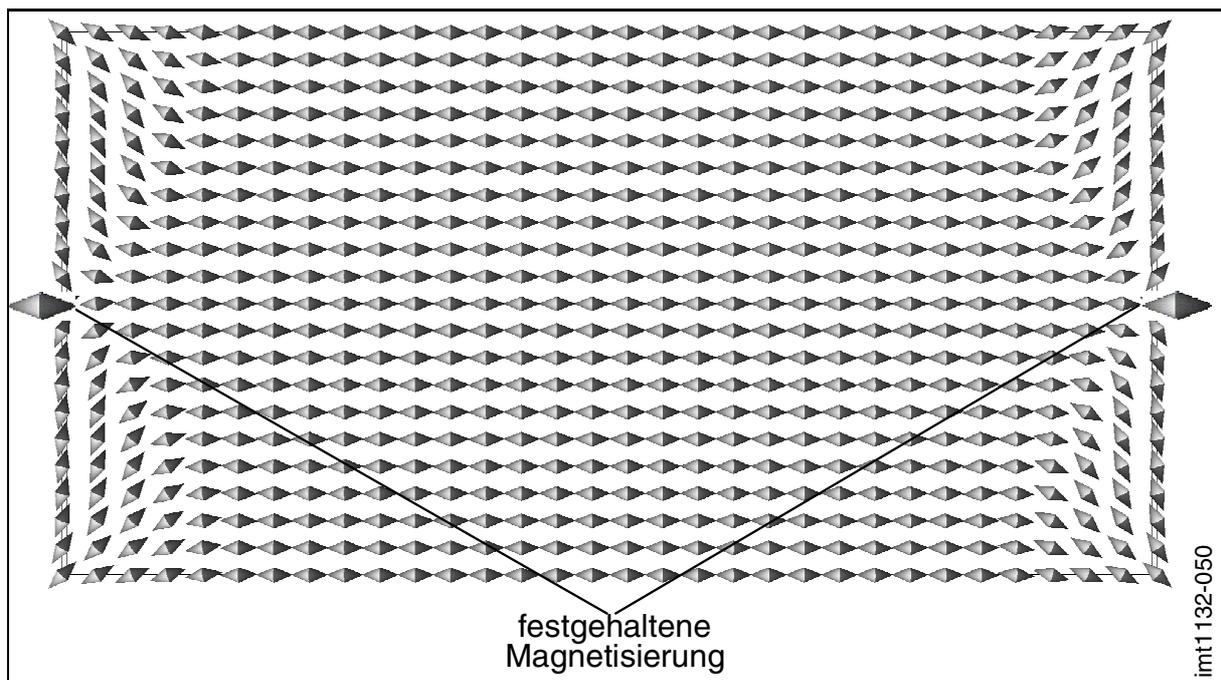


Bild 6.5: Einschränkungsbefingung beim Sprezzustand

Da metastabile Zustände unter Umständen energetisch sehr nahe beieinander liegen können, ist es notwendig, mit einer hohen Präzision die Energien zu bestimmen. Um dies zu erreichen, läßt sich mit Hilfe eines maximalen Momentes ein Abbruchkriterium für die Simulation festlegen. Hierbei wird das Moment aus Gl. 2.20 über alle Knoten summiert. Das maximale Moment definiert, daß der Iterationsalgorithmus bei Unterschreiten dieses maximalen Momentes abbricht. Ist dieser Wert gering gesetzt, bedeutet dies, daß eine starke Relaxation stattfindet. Ein weiterer möglicher Fehler ist der Diskretisierungsfehler. Dieser tritt auf, wenn die Diskretisierung zu grob gewählt ist und somit die Differentialgleichung ungenügend genau beschrieben wird. Dieser Diskretisierungsfehler sinkt, wenn die Zahl der Elemente erhöht wird. Da man aber sehr schnell zu einem extrem hohen Speicher- und Rechenzeitbedarf gelangt, ist es nicht immer möglich, eine hohe Diskretisierung zu verwenden. Um dennoch aussagekräftige Ergebnisse zu erlangen, kann aus Rechnungen mit geringer Diskretisierung die Energie der unendlichen Diskretisierung extrapoliert werden. Dies geschieht mit der Methode der „kleinsten Fehlerquadrate“ [PRE92]. Bild 6.6 zeigt einen typischen Verlauf der Energie in Abhängigkeit der Diskretisierung.

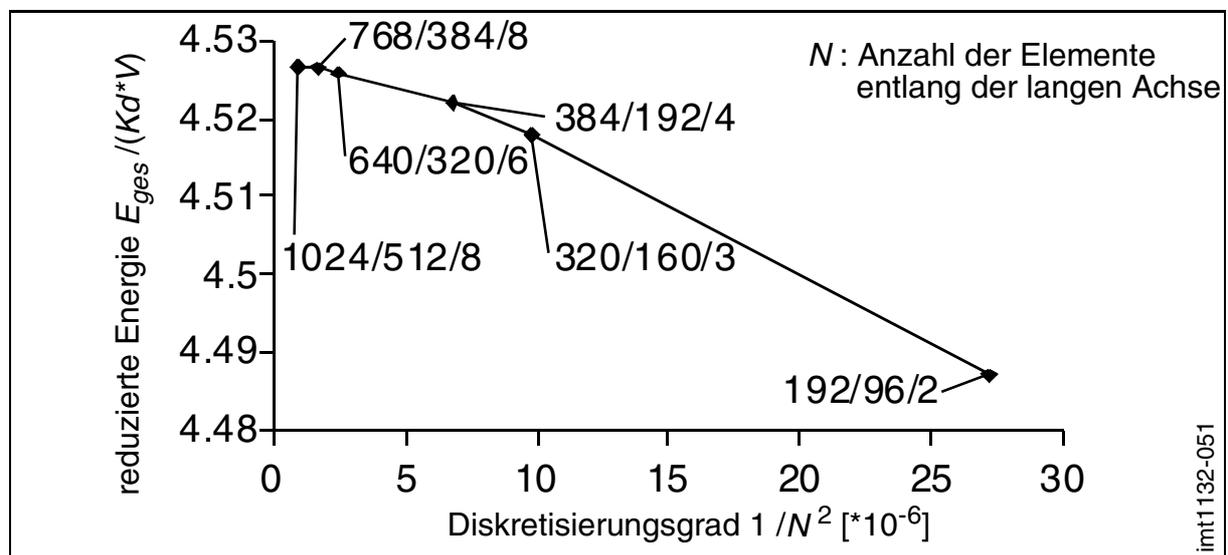


Bild 6.6: Extrapolation der Energie zur unendlichen Diskretisierung

Die Diskretisierung ist direkt durch die Angabe der Anzahl der Elemente in den drei Raumrichtungen zu erkennen. Auf der X-Achse ist dann der quadrierte Kehrwert der Gesamtzahl der Elemente angegeben. Man erkennt, daß die Energie einem Maximum zustrebt, welches durch Extrapolation der Energie zur unendlichen Diskreti-

sierung, d.h. dem Schnittpunkt der Kurve mit der Y-Achse, eindeutig bestimmt werden kann. Je nachdem, ob das Ergebnis einer Simulation dazu dient quantitativ einen Vergleich zu anderen Simulationen zu bringen oder qualitativ die exakte Energie zu bestimmen, kann entsprechend eine gröbere oder es muß eine feinere Diskretisierung gewählt werden. Das bereits erwähnte Extrapolationsverfahren zu einer unendlichen Diskretisierung führt, aufgrund der mehrfachen Berechnung mit unterschiedlichen Gittern, zu sehr hohen Rechenzeiten. Wird aus Zeitgründen nur eine einzige Rechnung mit einer geringen Diskretisierung erwünscht, geht dies auf Kosten der Genauigkeit. Es ist aber immer ein mindester Diskretisierungsgrad erforderlich. Dieser sollte erfahrungsgemäß die Elementgröße von dem ein- bis zweifachen der Austauschlänge ($\sqrt{A/K_d}$) nicht überschreiten [HUB98a]. Diese Größe ist notwendig, um Domänenwände genügend aufzulösen. Die Wandweiten liegen in Größenordnungen von ungefähr dem zehnfachen der Austauschlänge.

6.2.2 Nullfeld-Konfigurationen

Die Ergebnisse der Simulation von möglichen metastabilen Zuständen werden im folgenden für das Beispiel der Variante 1 und 2 mit einer Kantenlänge der langen Seite von $2\ \mu\text{m}$ gezeigt. Hierbei wurde keine Erregung durch ein äußeres Feld angenommen. Die untersuchten Konfigurationen entsprechen der in Kapitel 2.4 vorgestellten Domänenkonfigurationen. Die ungefähre Form der Zustände ist bekannt, lediglich die Position der Wände und Wirbel kann sich je nach Geometrie verändern. [Bild 6.7](#) und [Bild 6.8](#) zeigen eine Reihe von möglichen Konfigurationen. Sie lassen sich untergliedern in eindomänige und mehrdomänige Zustände. Der Spreiz-, der C- und der S-Zustand sind eindomänige Konfigurationen. Sie zeichnen sich dadurch aus, daß der Hauptanteil der Magnetisierungen in eine Richtung weist. Der Spreizzustand zeigt im Gegensatz zu der C- und S- Konfiguration eine symmetrische Anordnung. Um die hohen Streufelder der eindomänigen Zustände zu vermindern, ist es möglich, daß sich annähernd streufeldfreie Konfigurationen einstellen. Die gezeigten mehrdomänigen Strukturen weisen geschlossene oder zum Teil geschlossene Magnetisierungsverläufe auf. Gegebenenfalls sind ein oder mehrere Wirbel, d.h. Magnetisierungen senkrecht zur Oberfläche, möglich. Die in [Bild 6.7](#) und [Bild 6.8](#) gezeigten Rauten- und Stachelstrukturen unterscheiden sich in der Anzahl der Wirbel sowie in der Weise, wie die Magnetisierungen in das Zentrum des Wirbels münden.

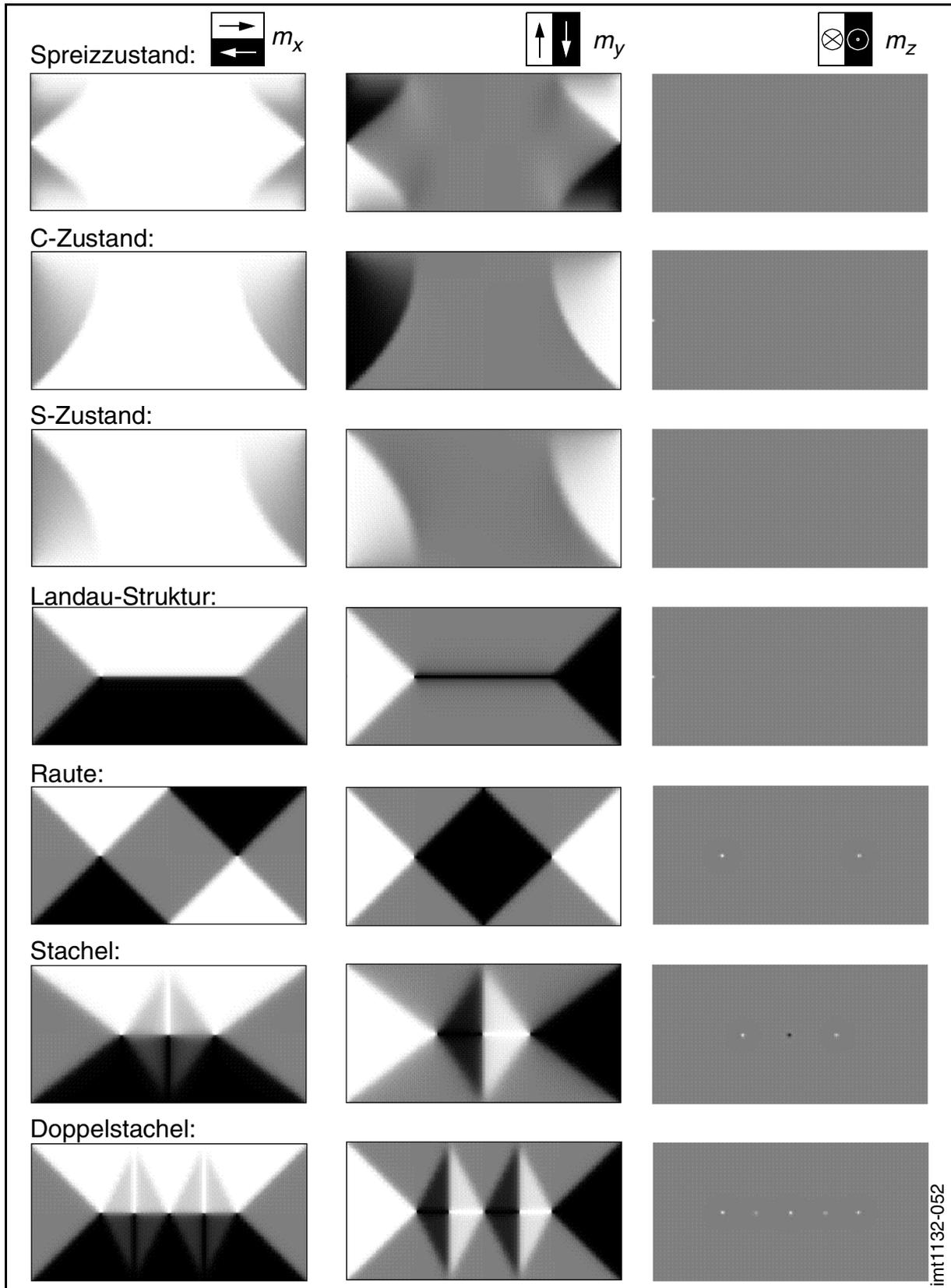


Bild 6.7: Mögliche metastabile Konfigurationen dünner Schichten mit einem Längenverhältnis von 2:1 (Variante 1) und einer Länge von $L = 2 \mu\text{m}$

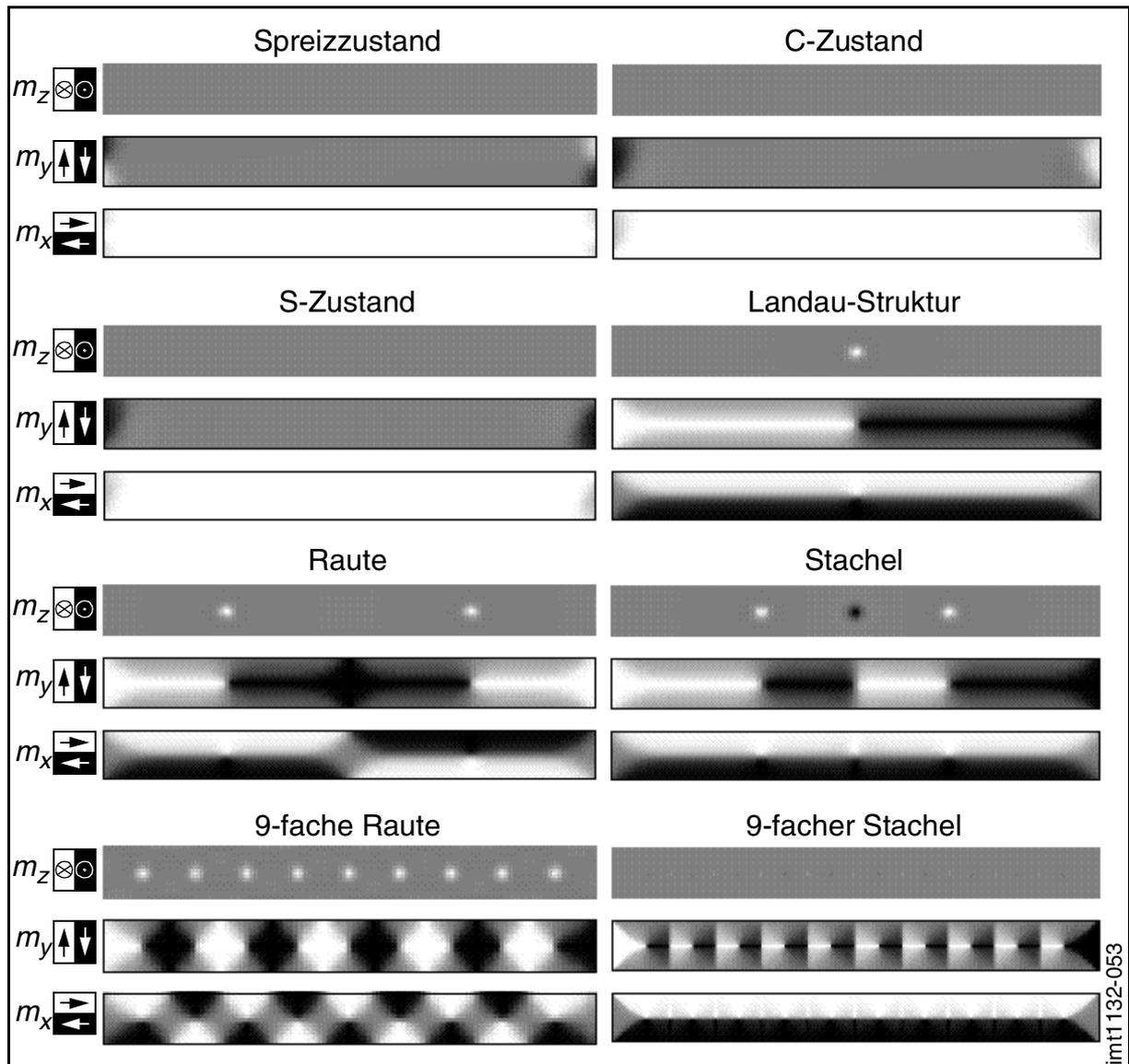


Bild 6.8: Mögliche metastabile Konfigurationen dünner Schichten mit einem Längenverhältnis von 2:1 (Variante 2) und einer Länge von $L = 2 \mu\text{m}$

6.2.3 Position der Wirbel

Bei der Berechnung der Konfigurationen aus Kapitel 6.2.2 wurden Einschränkungsbedingungen definiert. Handelt es sich um die Konfigurationen Raute oder Stachel, wird jeweils das Zentrum der vorhandenen Wirbel festgehalten (Bild 6.4). Die Position der Wirbel kann vorher jedoch nur geschätzt werden. Wird eine falsche Position des Wirbels für die Einschränkungsbedingung gewählt, wird ein Zustand erzwungen, der nicht reell existiert. Es muß somit eine Möglichkeit gefunden werden, um die Position der Wirbel exakt zu bestimmen. Die Verschiebung der Wirbel und eine gleichzeitige Beobachtung der Energie läßt die Bestimmung der optimalen Position der

Wirbel zu. Bild 6.9 zeigt diese Vorgehensweise für die einfache Rautenstruktur. Aufgetragen ist, abhängig von der Position des Wirbels, die reduzierte Gesamtenergie. Die Form der Kurve ähnelt einer Parabel. Das Minimum der Kurve, das sich durch Interpolation bestimmen läßt, stellt die optimale Position des Wirbels dar.

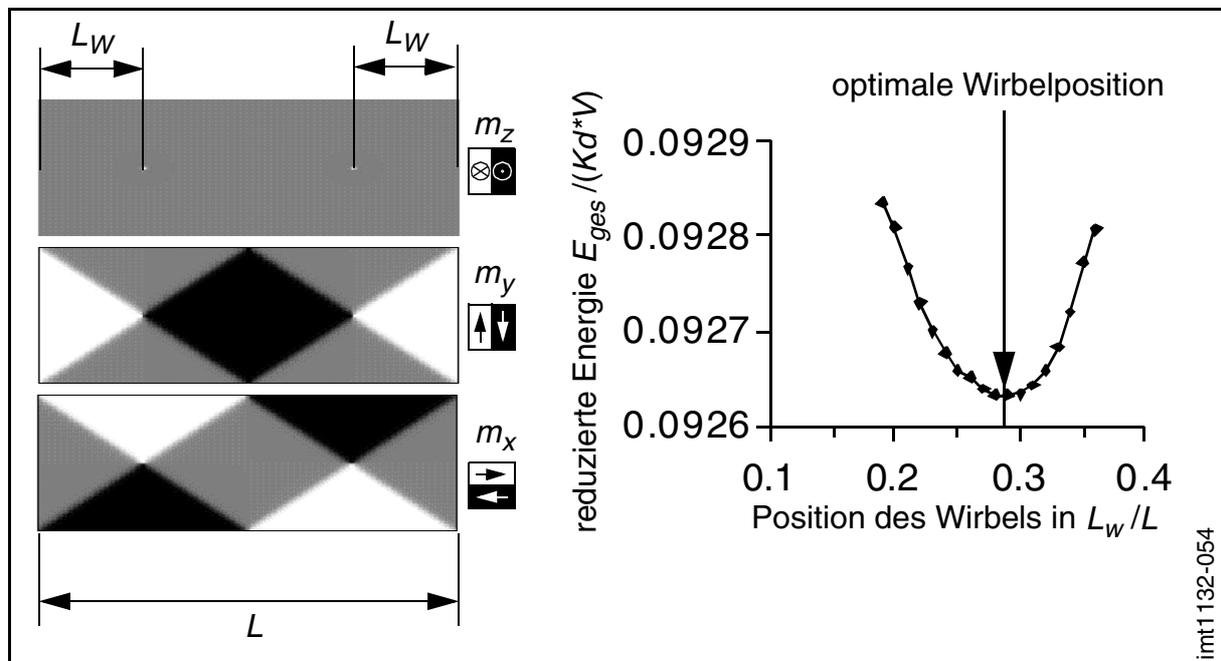


Bild 6.9: Bestimmung der Position der Wirbel einer Raute für Variante 2

In gleicher Weise kann auch die Wirbelposition einer Stachelstruktur gefunden werden, wie Bild 6.10 darstellt. Die Stachelstruktur weist im Gegensatz zur Rautenstruktur eine höhere Anzahl von Wirbeln auf, die entgegengesetzt magnetisiert sind. Die Abstände dieser Wirbel werden als äquidistant angenommen. Dies ist ebenso bei Mehrfachrauten und -stacheln der Fall. Es fällt auf, daß bei dem einfachen Stachel in Bild 6.10 die Energie bei einer Verringerung der Wirbelposition, ausgehend von der optimalen Wirbelposition, nur leicht ansteigt und dann sehr stark abfällt. Dies liegt daran, daß trotz der Einschränkungsbedingungen der einfache Stachel nicht erzwungen werden kann, sondern in die nächstliegende Rautenstruktur zerfällt. Dieses Verhalten ist nur bei einer geringen Anzahl von Stacheln zu erkennen. Bereits bei 5 Stacheln sind die Strukturen so stabil, daß bei einer inkorrekten Wirbelposition die entsprechende Struktur bestehen bleibt.

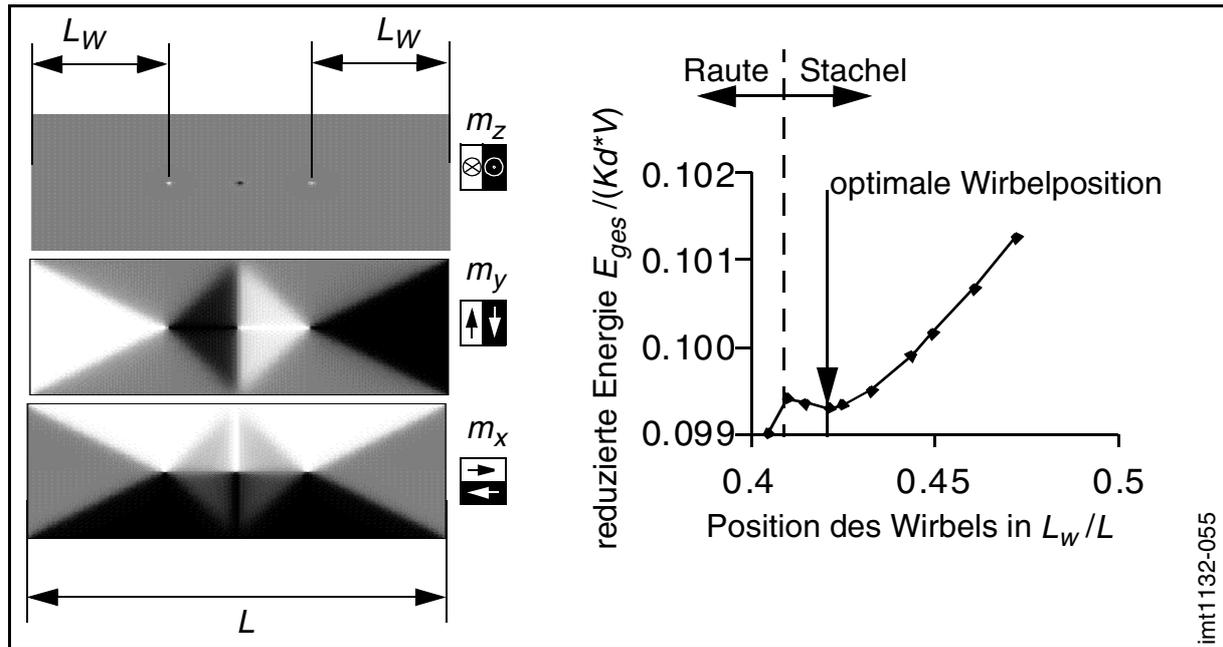


Bild 6.10: Bestimmung der Position der Wirbel einer Stachelstruktur für Variante 2

Da insbesondere bei hohen Aspektverhältnissen Stachel, bzw. Rauten mit einer höheren Anzahl von Wirbeln auftreten können, ist es erforderlich, die Position der Wirbel für jede Struktur getrennt zu bestimmen. [Bild 6.11](#) zeigt den Zusammenhang zwischen der Anzahl der Stachel, bzw. Rauten und der Wirbelposition für Variante 2.

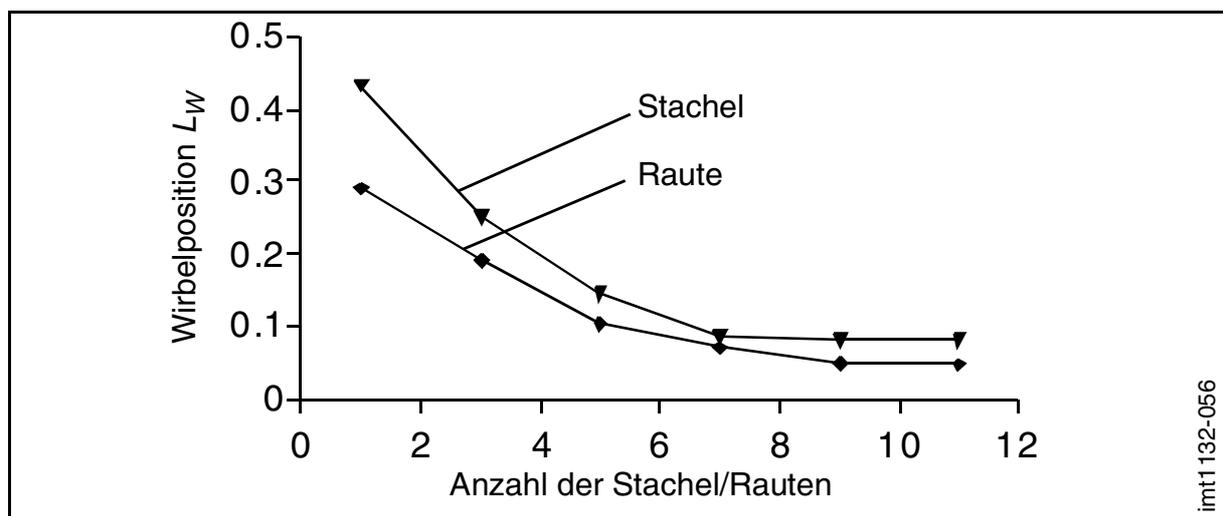


Bild 6.11: Wirbelpositionen in Abhängigkeit der Anzahl der Stachel, bzw. Rauten für Variante 2

Man erkennt, daß die Rautenstrukturen insgesamt einen größeren Abstand zwischen den Wirbeln besitzen daran, daß die Wirbelposition geringer ist. Die Abhän-

gigkeit der Wirbelposition von der Länge der Struktur ist gering und kann für grobe Rechnungen vernachlässigt werden. Für abschließende und vergleichende Ergebnisse wurden in dieser Arbeit für jede Länge rechts und links von der erwarteten Wirbelposition zwei weitere Wirbelpositionen untersucht. Für den Fall, daß die mittlere Wirbelposition zu der geringsten Energie führt, wird diese Rechnung angenommen, ansonsten muß die Simulation für eine andere Position wiederholt werden. Es konnte jedoch festgestellt werden, daß kaum eine Variation der ursprünglich berechneten Wirbelposition erforderlich war. Eine weitere Möglichkeit, die Genauigkeit der Wirbelpositionen festzustellen, ist die Durchführung einer Simulation mit anschließendem Lösen der Einschränkungbedingungen. Nach erneuter Rechnung kann die Energie und auch die Magnetisierungskonfiguration mit der vorherigen verglichen werden.

6.2.4 Längenabhängigkeit der Gesamtenergie

Die Berechnung der Energie der vorgestellten Konfigurationen wurde in Abhängigkeit der Länge L durchgeführt. Hierbei wurde jeweils auf eine unendliche Diskretisierung extrapoliert und die Position bei vorhandenen Wirbeln optimiert. Vergleicht man die Energien, kann man in Abhängigkeit der Länge L die Konfiguration mit der geringsten Energie ermitteln. Für Variante 1 ([Bild 6.12](#)) zeigt sich, daß bis zu einer Länge von ca. 100 nm der Spreizzustand die günstigste Konfiguration darstellt. Bei größeren Längen wird dieser dann von den energetisch fast äquivalenten C- und S-Zuständen abgelöst. Durch den starken Anstieg der Energie der eindomänen Zustände bei zunehmender Länge, stellt die günstigste Konfiguration, ab einer Länge von ca. 220 nm, die Landastruktur dar. Erst bei ca. 1.08 μm übernimmt die Rautenstruktur die Position der Konfiguration mit der geringsten Energie und hält diese bis zu den Längen von 4-5 μm . Bei noch größeren Längen läßt sich vermuten, daß die Stachel- und Doppelstachelstruktur die stabilsten Strukturen sind. Der genaue Übergang von der Rautenstruktur in die Stachelstruktur konnte nicht bestimmt werden, da die großen Längen eine extrem hohe Anzahl von Elementen erfordern, welche die zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten überstiegen.

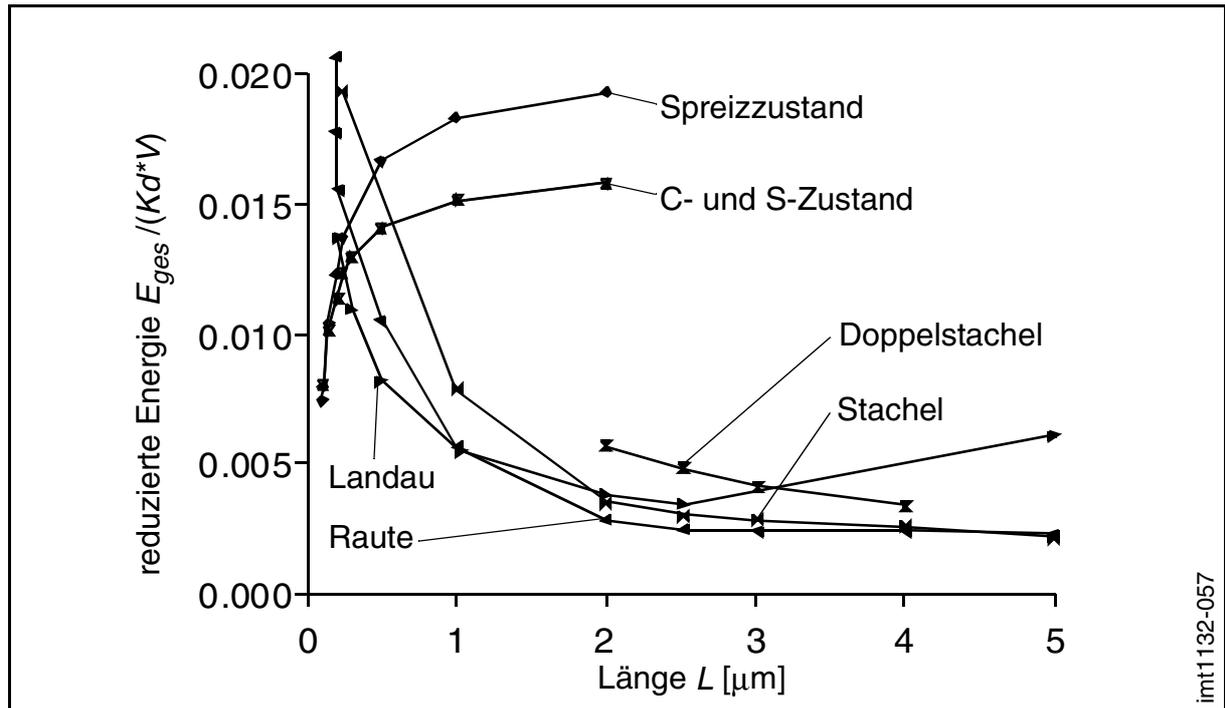


Bild 6.12: Längenabhängige Gesamtenergie der einzelnen Konfigurationen für Variante 1 [RAV99]

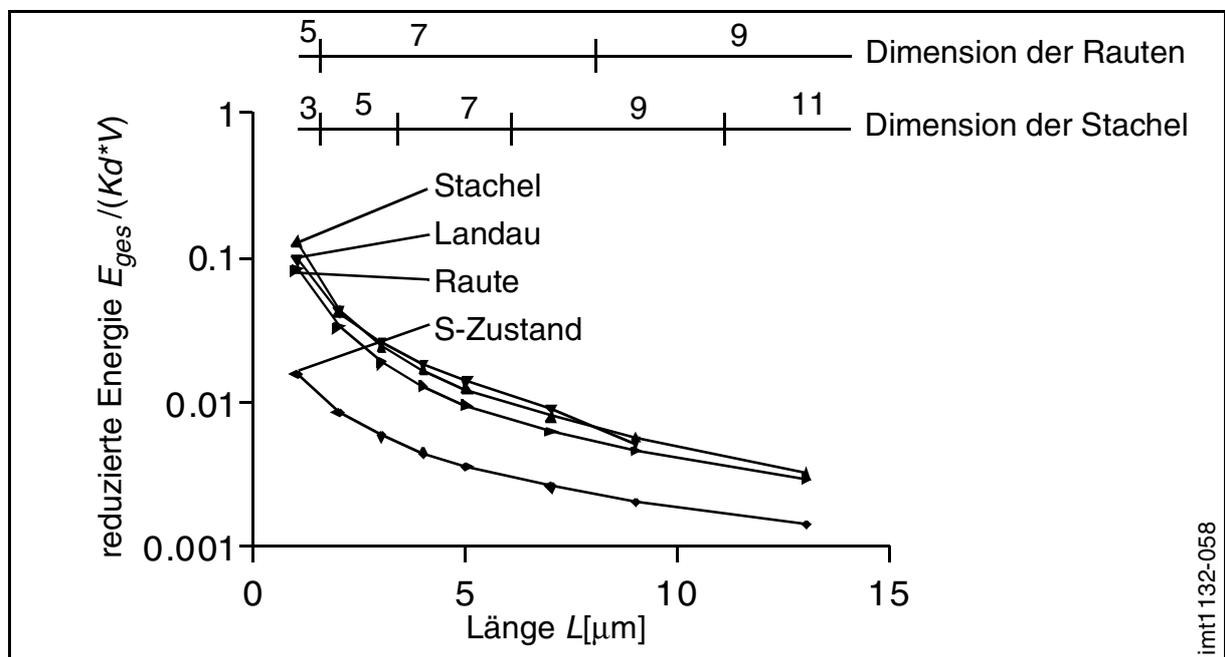


Bild 6.13: Längenabhängige Gesamtenergie der einzelnen Konfigurationen für Variante 2

Variante 2 (Bild 6.13) weist eine andere Charakteristik auf. Durch das hohe Aspektverhältnis von Länge zu Breite, gewinnen nun auch höhere Stachel- und

Rautendimensionen an Bedeutung. Im unteren Längenbereich werden eindeutig die eindomänigen Spreiz-, C- und S- Zustände bevorzugt. Die Differenzen der Energien dieser Konfigurationen sind so gering, daß nur der S-Zustand abgebildet wurde. Bei sehr geringen Größen zeigt sich, daß Landau-, Stachel- und Rautenstrukturen eine im Vergleich sehr hohe Energie besitzen, welche aber mit zunehmender Länge sehr rasch abnimmt. Die Energie der eindomänigen Konfigurationen sinkt ebenfalls, allerdings nicht so stark. Für die Y-Achse wurde eine logarithmische Skalierung gewählt, um die Unterschiede zwischen den Kurven deutlicher hervorzuheben. Ebenso wurden nicht die Ergebnisse aller Stachel- und Rautenstrukturen dargestellt, sondern die, der jeweils energetisch niedrigsten Konfiguration. Die entsprechende Dimension ist sowohl für die Rautenstruktur als auch für die Stachelstruktur angegeben. Es ist deutlich, daß mit zunehmender Länge höhere Dimensionen an Stachel und Rauten bevorzugt werden. Die Landaustruktur ist getrennt dargestellt und liegt energetisch im Bereich der Stachelstrukturen. Die Rautenstrukturen hingegen zeigen, daß sie energetisch bevorzugt werden. Obwohl sich die Einzeldomänen den Mehrfachdomänen mit zunehmender Länge annähern, kann nicht vorhergesagt werden, wann die Kurven zum Schnittpunkt führen. Daß sie einen Schnittpunkt besitzen, ist eindeutig, da der Einfluß der Formanisotropie mit zunehmender Länge abnimmt. Dies läßt sich dadurch begründen, daß trotz der hohen nichtlokalen Eigenschaft der Oberflächenstrefelder (Formanisotropie), der Einfluß auf das Zentrum, bei Erhöhung der Abmaße des Systems, sinkt.

6.2.5 Kritische Größe des Spreizzustandes

Bei beiden Varianten ist auffällig, daß die Energien vom Spreizzustand und der Zustände C und S bei kleinen Längen sehr nahe beieinander liegen. Bei sehr kurzen Längen ist der Spreizzustand die stabilste Konfiguration. Mit zunehmender Länge jedoch wird die Symmetrie gebrochen und der C- bzw. S-Zustand wird bevorzugt. Diese Länge, bei der die spontane Symmetriebrechung erfolgt, wird im folgenden als kritische Länge l_{krit} bezeichnet und kann genau bestimmt werden. Hierzu muß in Abhängigkeit der Länge die Y-Komponente der Magnetisierung auf der Y-Symmetrieachse betrachtet werden (Bild 6.14). Ist diese Komponente Null, liegt eine Symmetrie vor, d.h. es handelt sich um einen Spreizzustand. Bricht die Symmetrie, so ist dies anhand der Steigung von m_y erkennbar. Trägt man m_y quadriert auf und extrapoliert

zu Null, so kann man die kritische Länge bestimmen. Sie beträgt ca. 580 nm für Variante 2 und ca. 100 nm für Variante 1 [RAV99].

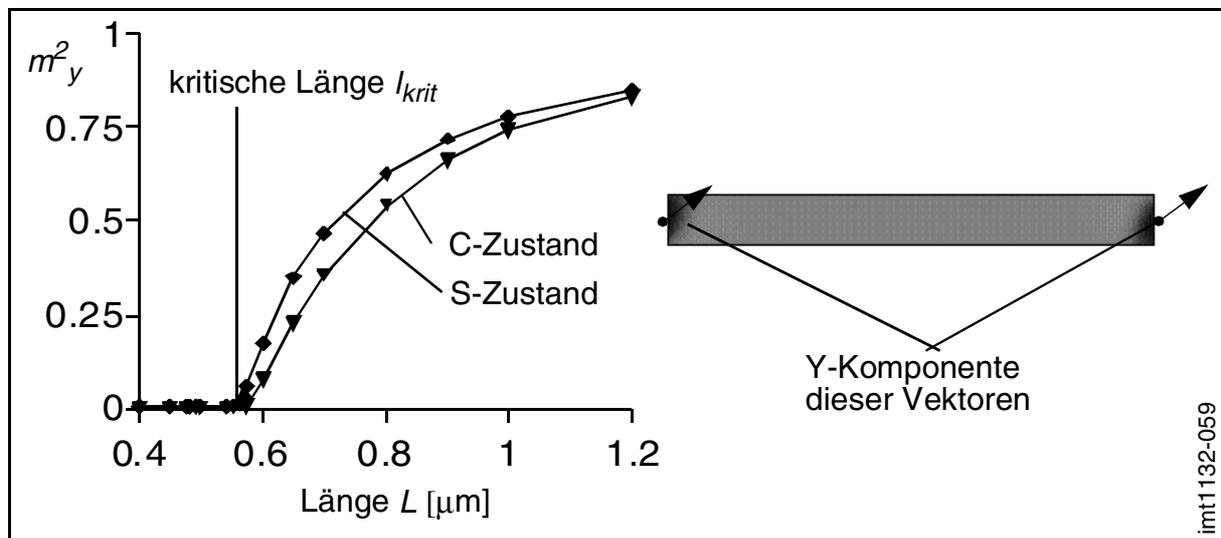


Bild 6.14: Bestimmung der kritischen Länge für den Übergang vom Spreizzustand in die C/S-Konfiguration

Vergleicht man die Kurvenverläufe für die Zustände S und C, läßt sich erkennen, daß die Symmetriebrechung bei Variante 2 in den S-Zustand kurz vorher auftritt. Bei Variante 1 ist dies umgekehrt. Hier tritt der C-Zustand früher auf [RAV99]. Allerdings ist die Differenz nur sehr gering.

6.2.6 Stabilität des Spreizzustandes

In dem vorherigen Kapitel konnte gezeigt werden, daß ab einer kritischen Länge der Spreizzustand instabil wird. Durch die Verwendung von Einschränkungsbedingungen für den Spreizzustand wird eine Stabilität erzwungen. Dies wird dadurch ermöglicht, daß die Y-Komponente der Mittenvektoren der Stirnseiten des Elementes zu Null gesetzt werden. Wird diese Einschränkungsbedingung entfernt, kann dies dazu führen, daß eine Symmetriebrechung erfolgt und sich unkontrolliert ein C- oder S-Zustand einstellt. Diese Symmetriebrechung kann allerdings sehr gering sein. Zur Berechnung der Energie des Spreizzustandes ist die Einschränkungsbedingung somit unbedingt erforderlich. Es ist notwendig zu untersuchen, ob oberhalb der kritischen Grenze der Spreizzustand wieder stabil wird. Eine systematische Untersuchung der Stabilität des Spreizzustandes ist möglich, indem man den ausgezeichneten Vektor in [Bild 6.15](#) festhält und ihn relativ zur X-Achse in der Schichtebene um den Winkel φ

verkippt. Für den Fall, daß dieser Winkel gleich Null ist, hat man eine erzwungene Symmetrie. Für den Fall ungleich Null hat man eine induzierte Asymmetrie. Besitzen der vordere und der hintere Winkel dasselbe Vorzeichen, so wird ein S-Zustand induziert. Sind die Winkel im Vorzeichen entgegengesetzt, wird ein C-Zustand eingeprägt. Betrachtet man während der Veränderung des Winkels die reduzierte Energie, kann man erkennen, daß sie sich parabelförmig ändert (Bild 6.15).

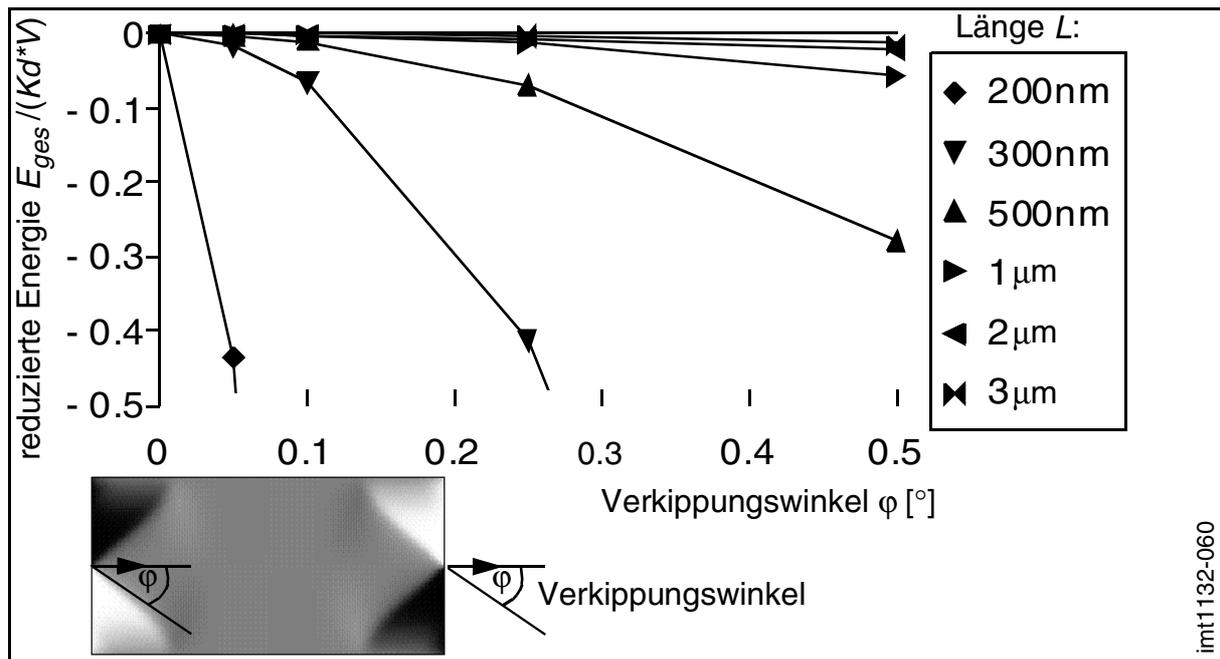


Bild 6.15: Beeinflussung der Energie durch die Verkipfung ausgezeichneter Vektoren in Abhängigkeit der Länge L für den Spreizzustand (Variante 1)

Von diesen Kurven kann nun, in Abhängigkeit der Länge L , die Krümmung bestimmt werden. Eine positive Krümmung bedeutet, daß die erzwungene Symmetrie in Wirklichkeit auch eine natürliche Symmetrie ist und der Spreizzustand als Konfiguration stabil ist. Eine negative Krümmung zeigt, daß die induzierte Asymmetrie bevorzugt wird. Der Spreizzustand ist somit nicht stabil, sondern die Konfiguration zerfällt in den C- oder S-Zustand. In Bild 6.16 kann man für Variante 1 anhand der negativen Krümmung erkennen, daß der Spreizzustand oberhalb von 100 nm energetisch nicht nur ungünstiger als die unsymmetrischen Zustände C und S ist, sondern auch instabil. Eine exakt symmetrische Konfiguration läßt sich somit für diese Längen nicht erreichen. Allerdings zeigt die Kurve auch, daß bei steigender Länge die Krümmung langsam verschwindet. Ein Übergang der Krümmung in positive Werte ist bei sehr

großen Längen denkbar, jedoch lassen sich diese Konfigurationen bislang aufgrund der hohen Rechenzeit- und Speicheranforderungen nicht genau bestimmen. Für Variante 2 hingegen konnten Berechnungen der Krümmungen auch für größere Längen durchgeführt werden, da durch die geringere Breite mehr Elemente in Längsrichtung verwendet werden konnten. Betrachtet man die Rechnungen der Variante 2 (Bild 6.17), erkennt man, daß die Krümmung ab einer bestimmten Länge wieder abnimmt. Das System scheint somit auch für größere Längen keine Stabilität für den Spreizzustand aufzuweisen. Ob dies ebenso für Variante 1 gilt, läßt sich in dieser Arbeit nicht zeigen. Weiterhin ist zu erkennen, daß bei geringen Längen die Krümmung zu positiven Werten wechselt. Die Länge, die zu einer Krümmung von Null führt, entspricht der kritischen Länge aus Kapitel 6.2.5.

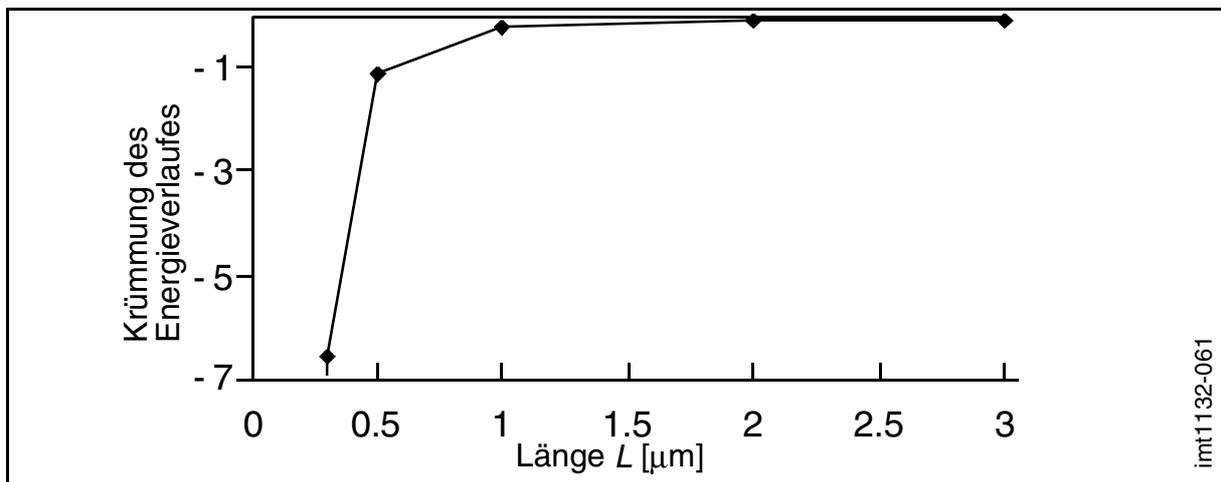


Bild 6.16: Darstellung der Krümmung des Energieverlaufes in Abhängigkeit der Länge L der Schicht (Variante 1)

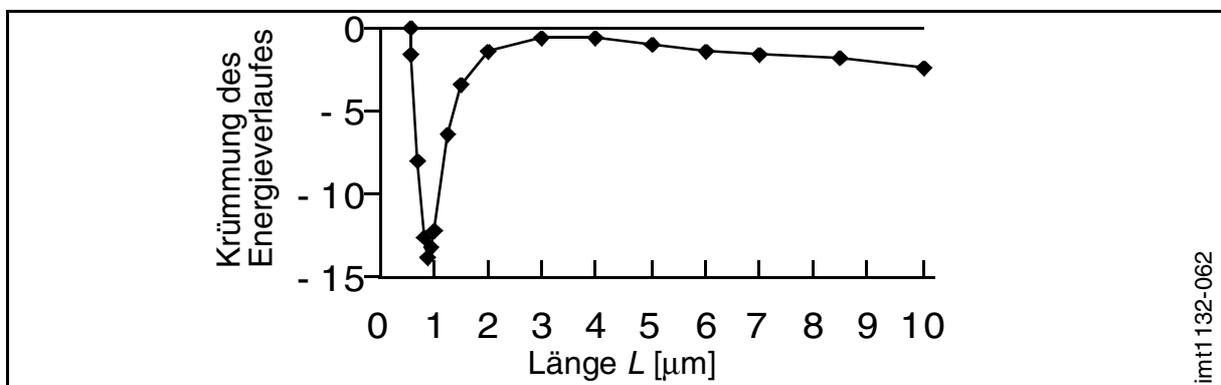


Bild 6.17: Darstellung der Krümmung des Energieverlaufes in Abhängigkeit der Länge L der Schicht (Variante 2)

6.3 Verlauf der Magnetisierung bei horizontaler Erregung

Im Gegensatz zu den in Kapitel 6.2.2 vorgestellten Nullfeld-Konfigurationen, können die stabilen Zustände auch in Abhängigkeit eines extern wirkenden Feldes bestimmt werden. Betrachtet man hierbei die gemittelte Magnetisierung $\bar{m} = \frac{1}{V} \int m dV$, läßt sich das Hystereseverhalten berechnen. Eine Schwierigkeit bei dieser Berechnung ist jedoch, daß abhängig von der Stärke des Feldes unterschiedliche Konfigurationen stabil sein können. Der Wechsel von einer Konfiguration zu einer anderen ist nicht immer eindeutig. So kann numerisches Rauschen die Ergebnisse leicht beeinflussen und beispielsweise ein frühzeitiges Schalten hervorrufen. Geht man von dem gesättigten Zustand bei positivem Feld aus, weiß man, daß dort eindeutig ein Spreizzustand als einzig mögliche Konfiguration auftritt. Da dieser Zustand bei geringen Feldern instabil werden kann, ist die Frage, von welchem Zustand er bei welchem exakten Feld abgelöst wird. Der erste Übergang, welcher in der Regel noch bei positivem Feld stattfindet, ist der Übergang vom Spreizzustand in die energetisch sehr nahe liegenden C-, bzw. S- Zustände. Die Bestimmung des exakten Feldes wird in Kapitel 6.3.1 vorgestellt. Die Feldstärke, bei der nun das System von einer positiven zu einer negativen Magnetisierung schaltet, also die Koerzitivitätsfeldstärke H_c , wird mit Hilfe einer sogenannten Suszeptibilitätsmethode bestimmt. Sie wird in Kapitel 6.3.2 näher beschrieben.

6.3.1 Übergang vom Spreizzustand in die Zustände C und S

Die Konfiguration, die bei einem hohen externen Feld auftritt, ist der Spreizzustand. Dieser Zustand läßt sich dadurch begründen, daß die *Zeeman* Energie bei hohen externen Feldern den höchsten Anteil an der Gesamtenergie besitzt. Beim Spreizzustand richten sich die meisten Magnetisierungen in Richtung des externen Feldes aus, und somit ist dies der Zustand geringster Energie. Der Grad der Spreizung kann unterschiedlich ausgeprägt sein. Da bei einigen Geometrien der Spreizzustand bei einem geringen externen Feld nicht mehr stabil ist, sondern von den Zuständen C und S abgelöst wird, ist es erforderlich, diesen Übergang genauer zu untersuchen. Als Maß der Symmetrie des Spreizzustandes dient ein zweifaches Integral der Y-Komponente der Magnetisierung über die halbe Breite und gesamte Länge der Schicht, entlang der mittleren XY-Symmetrieebene. Dieses Integral ist Null für den Fall, daß die Konfiguration symmetrisch ist. Sie ist ungleich Null, wenn die Symmetrie gebrochen

wird. Somit ist eindeutig ein Maß gefunden, mit dem sich der Spreizzustand vom C-, bzw. S-Zustand unterscheiden läßt. Trägt man den Grad der Symmetrie über das externe Feld auf, erhält man den in [Bild 6.18](#) dargestellten Verlauf. Hier zeigt sich, daß die Symmetrie spontan bei einem ausgezeichneten Feld gebrochen wird und sich dann die Asymmetrie verstärkt. Dieses Verhalten kann für unterschiedliche Längen beobachtet werden. In allen Fällen ist die Charakteristik dieselbe. Für die Hystereseeigenschaft des Systems bedeutet dies, daß oberhalb dieser Felder der Spreizzustand und unterhalb der C-, bzw. S-Zustand auftritt.

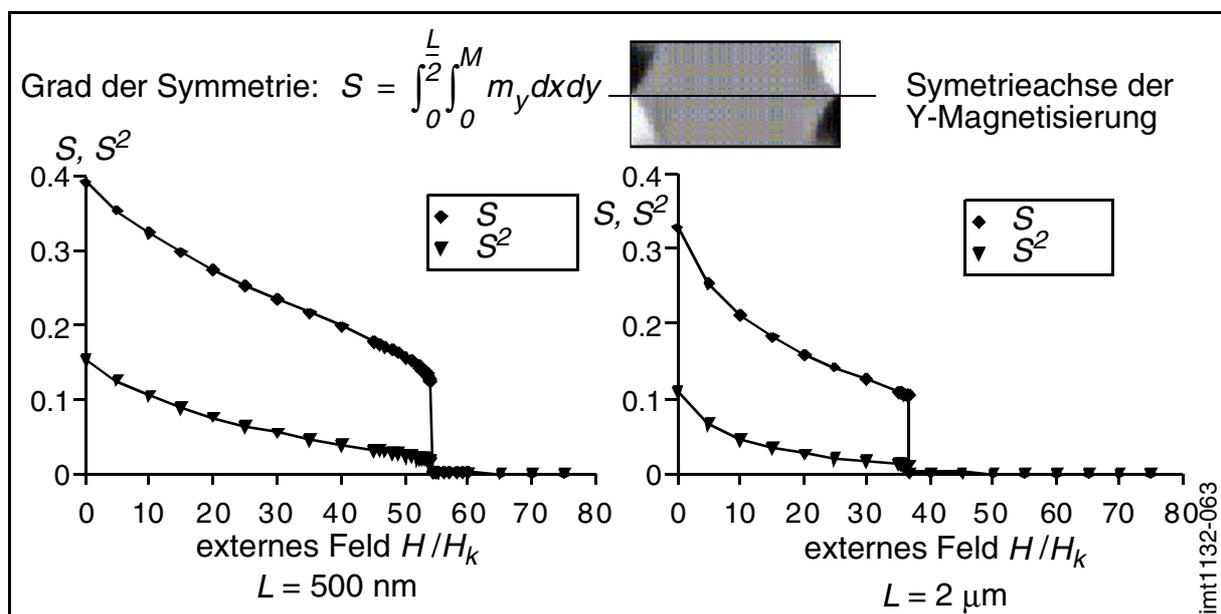


Bild 6.18: Übergang vom Spreizzustand in den S-Zustand bei $L = 500 \text{ nm}$ und $L = 2 \mu\text{m}$ für Variante 1

Die Darstellungen in [Bild 6.18](#) zeigen Ergebnisse für die Variante 1 für zwei verschiedene Längen. Das Feld der Symmetriebrechung kann in beiden Fällen leicht ermittelt werden. Bei $L = 500 \text{ nm}$ liegt das kritische Feld bei $54,1 H_k$ und bei $L = 2 \mu\text{m}$ bei $36,7 H_k$. Auffällig ist auch, daß der Übergang von dem unsymmetrischen Zustand in den symmetrischen Zustand bei der kurzen Länge ($L = 500 \text{ nm}$) nicht so spontan erfolgt, wie bei der größeren Länge ($L = 2 \mu\text{m}$). Bei der Darstellung wurde nur der Übergang vom S-Zustand in den Spreizzustand aufgetragen, da der entsprechende Übergang vom C-Zustand in dieser Ansicht exakt identisch ist. Betrachtet man jedoch sehr detailliert den Bereich des kritischen Feldes, wie in [Bild 6.19](#) für die Länge $L = 2 \mu\text{m}$ dargestellt, wird deutlich, daß der Spreizzustand leicht früher in den C-

Zustand schaltet und dann erst in den S-Zustand. Allerdings ist die Differenz so gering, daß hieraus nicht eindeutig wird, welchen Weg ein reelles System nimmt. Der Unterschied für die Hystereseurve ist ebenfalls sehr gering.

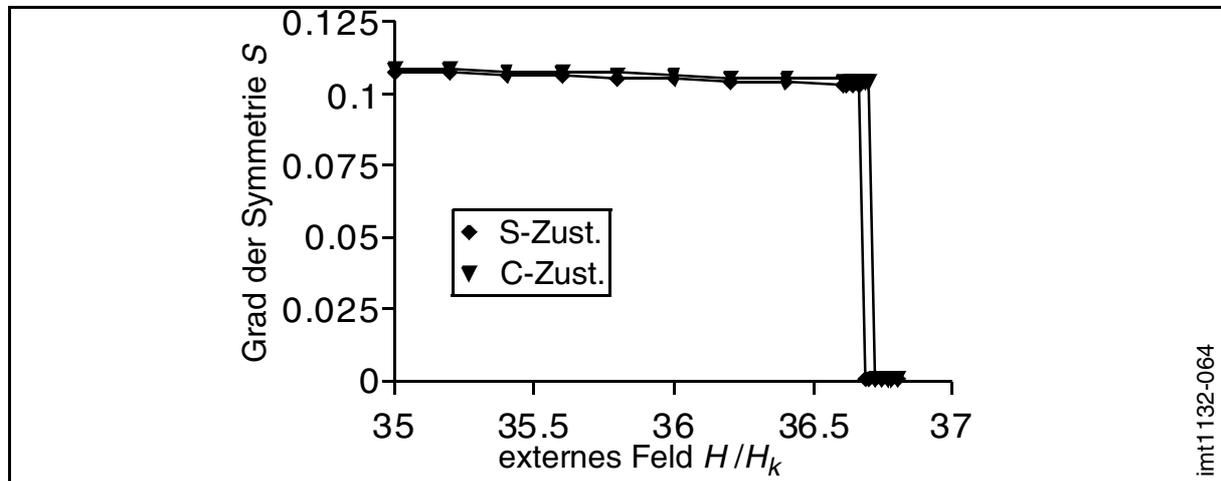


Bild 6.19: Übergang vom Sprezzustand in den C- und S-Zustand für $L = 2 \mu\text{m}$

Der Übergang für die Variante 2 ist nicht so eindeutig, wie der von Variante 1. **Bild 6.20** zeigt den Grad der Symmetrie für die Längen 500 nm und $2 \mu\text{m}$. Man sieht, daß der Übergang nicht spontan ist. Das kritische Feld der Symmetriebrechung kann somit auch nur annähernd bestimmt werden. Für die Länge von 500 nm läßt sich das kritische Feld zu ca. $85 H_k$ und für $2 \mu\text{m}$ zu ca. $60 H_k$ ermitteln. Der Unterschied zwischen dem C- und dem S- Zustand ist kaum erkennbar und wird daher hier nicht getrennt betrachtet.

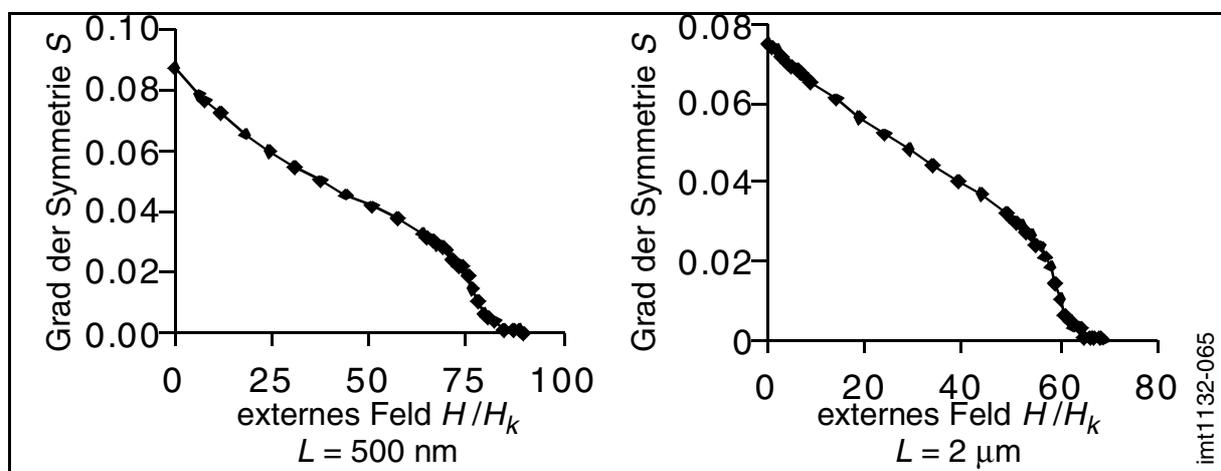


Bild 6.20: Übergang vom Sprezzustand in den S-Zustand bei $L = 500 \text{ nm}$ und $L = 2 \mu\text{m}$ für Variante 2

Da die weiterhin untersuchten Hystereseigenschaften eine Erregung unterhalb des kritischen Feldes von den Zuständen C und S erfahren, ist es im folgenden nicht mehr erforderlich, den Spreizzustand zu berücksichtigen. Die Hystereseurve ergibt sich aus der mittleren Magnetisierung des Systems, die man direkt für die beiden Zustände berechnen und auftragen kann. Man erkennt, wie in [Bild 6.19](#) dargestellt, daß für den S- und C-Zustand unterschiedliche Kurven auftreten. Welche dieser beiden Pfade in Wirklichkeit eingeschlagen wird, ist nicht vorhersagbar, da der Übergang vom Spreizzustand in den C-, bzw. S-Zustand sehr nahe beieinander liegt und von unterschiedlichen Faktoren abhängen kann, wie z.B. der Ausrichtung des externen Feldes oder Gitterfehlstellen. Hat sich einmal einer dieser Zustände eingestellt, ist ein unerzwungener Wechsel zwischen diesen Zuständen nicht wahrscheinlich, da er mit einem relativ hohen Anstieg der Energie verbunden wäre. Von hohem Interesse, insbesondere für die technische Anwendung, ist das exakte Schaltfeld (Koerzitivitätsfeldstärke H_c). Betrachtet man einen typischen Magnetisierungsverlauf ([Bild 6.23](#)), kann man erkennen, daß der Schaltpunkt durch ein Absinken der gemittelten Magnetisierung angekündigt wird. Eine Möglichkeit den exakten Punkt des Schaltens zu bestimmen, ist die Suszeptibilitätsmethode. Hierbei wird die Änderung der Magnetisierung in Abhängigkeit vom äußeren, magnetischen Feld (dm/dh) aufgetragen. Es ist nun möglich, daß diese Suszeptibilität ein eindeutiges Verhalten aufweist und eine Extrapolation des Schaltfeldes ermöglicht.

6.3.2 Bestimmung des Schaltfeldes mittels der Suszeptibilitätsmethode

Reduziert man das externe Feld ausgehend von einem gesättigten Zustand, erreicht man das Schaltfeld, bei dem die gemittelte Magnetisierung \bar{m} von einem positiven Wert in einen negativen Wert wechselt. Der Übergang kann unterschiedlich ausgeprägt sein, wie bereits in Kapitel 2.5 beschrieben. Von den drei gezeigten Fällen des asymmetrischen, katastrophalen und des kontinuierlichen Schaltens läßt sich vermuten, daß bei den hier betrachteten Beispielen das asymmetrische Schalten auftritt. Dies läßt sich dadurch begründen, daß das kontinuierliche Schalten überwiegend bei einem Feld auftritt, das senkrecht zur uniaxialen Richtung liegt. Das katastrophale Schalten tritt nur auf, falls bis zu dem Schaltfeld eine Symmetrie vorherrscht. Diese Symmetrie wurde, wie in Kapitel 6.3.1 gezeigt werden konnte, bereits bei positivem Feld gebrochen. Für den Fall eines asymmetrischen Schaltens läßt sich nicht

unbedingt direkt anhand des Verlaufs der Magnetisierung das Schaltfeld bestimmen. Betrachtet man hingegen die Suszeptibilität, d.h. die Änderung der Magnetisierung in Abhängigkeit vom Feld (dm/dH), wird diese beim Schaltfeld im Falle des asymmetrischen Schaltens unendlich (siehe [Bild 6.21](#)). Die inverse Suszeptibilität strebt bei Annäherung an das Schaltfeld gegen Null. Bei günstigen Schaltvorgängen nimmt die inverse Suszeptibilität eine lineare Form ein und das Schaltfeld läßt sich einfach durch Extrapolation bestimmen. Wendet man diese Methode auf die Variante 2 mit einer Länge von $2\ \mu\text{m}$ an, erhält man einen Verlauf wie in [Bild 6.21](#) dargestellt. Man erkennt deutlich, wie die Suszeptibilität bei Reduzierung des externen Feldes immer stärker, bis ins Unendliche, ansteigt. Die inverse Suszeptibilität zeigt ebenfalls das erwartete Verhalten. Annähernd linear kann das Feld, bei dem die inverse Suszeptibilität verschwindet, extrapoliert werden zu $-32,8\ H_k$. Dies ist das Schaltfeld und somit die Koerzitivitätsfeldstärke. Da das Schaltfeld mit der Suszeptibilitätsmethode wie erwartet bestimmt werden konnte, ist gezeigt, daß es sich bei diesem Schaltvorgang um ein asymmetrisches Schalten handelt.

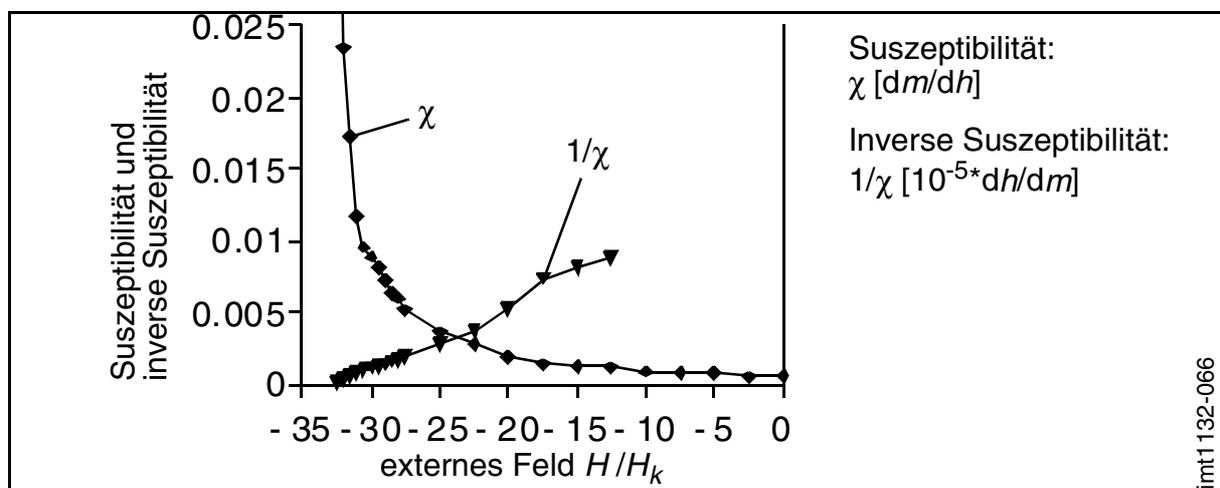


Bild 6.21: Verlauf der Suszeptibilität und ihrer Inversen für die Variante 2 bei $L = 2\ \mu\text{m}$

Um festzustellen, wie sich die Magnetisierungskonfiguration während des Schaltens verhält, ist es erforderlich, die Suszeptibilität jeder einzelnen Magnetisierung darzustellen ([Bild 6.22](#)). Man erkennt, daß der Schaltvorgang an den beiden Enden beginnt, nämlich dort, wo die Symmetrie bereits vorher gebrochen wurde. Der Keim, d.h. der Bereich wo die Suszeptibilität am größten ist, wandert dann leicht in Richtung

des Zentrums. Ist das Schaltfeld erreicht, schalten viele der Magnetisierungen spontan, wie für $h_{ex} = -32,8$ zu erkennen ist. Wichtig ist festzustellen, daß eine reine Verkipfung zu erkennen ist und das System nicht versucht, durch Zwischenkonfigurationen, wie z.B. Stachelstrukturen, zu schalten. In diesem Fall würde man Suszeptibilitätskeime im Zentrum finden.

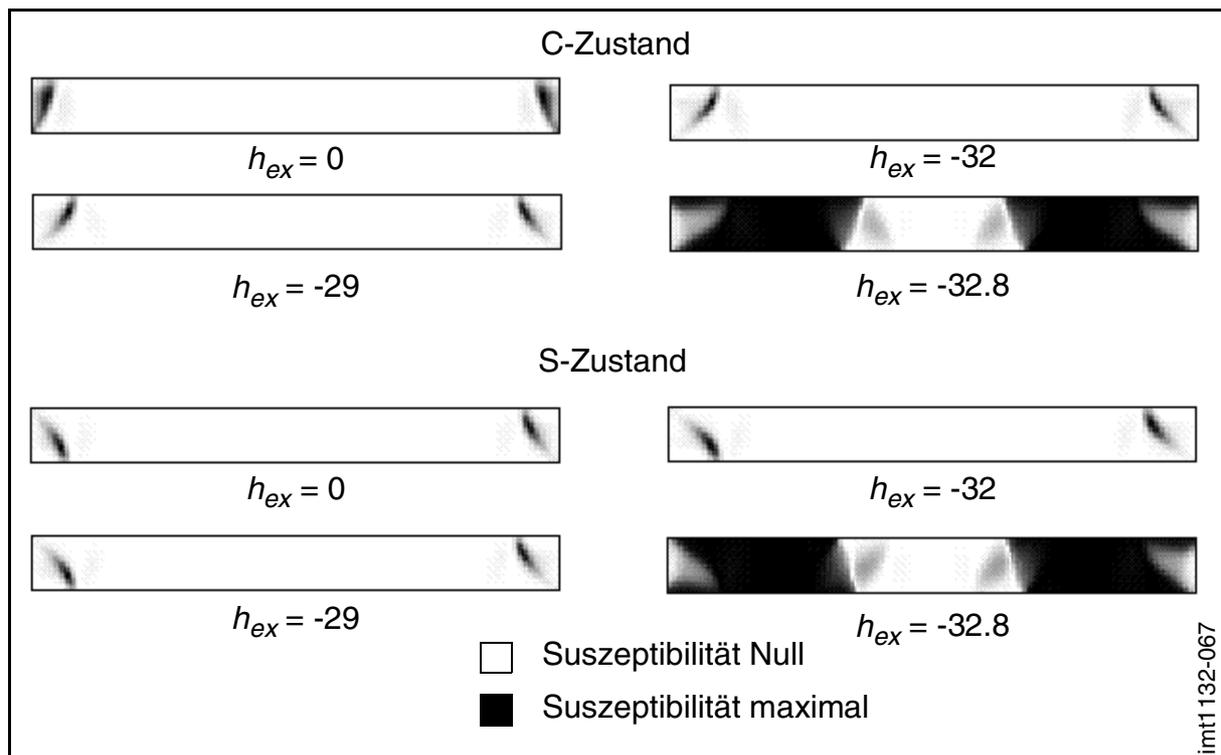


Bild 6.22: Verteilung der Suszeptibilität für Variante 2, Länge $L = 2 \mu\text{m}$

6.3.3 Hystereseverlauf

Betrachtet man die gemittelte Magnetisierung in Abhängigkeit des externen, parallel zur uniaxialen Richtung liegenden Feldes, läßt sich die Hysteresekurve erstellen. In [Bild 6.23](#) ist eine solche Kurve für die Variante 2 und der Kantenlänge von $2 \mu\text{m}$ dargestellt. Die Ergebnisse des Suszeptibilitätstests aus Kapitel 6.3.2 haben für das Schaltfeld ergeben, daß dieses bei $-32,8 H_k$ liegt. Man erkennt deutlich die starke Hysterese und den spontanen Übergang von positiver zu negativer Magnetisierung.

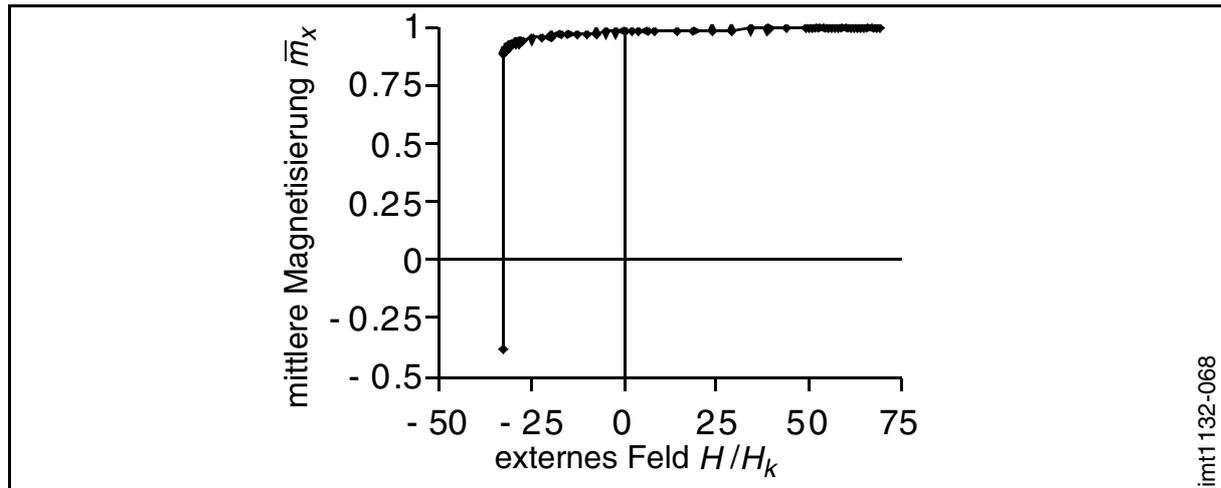


Bild 6.23: Hysterese für die Variante 2 bei einer Länge $L = 2 \mu\text{m}$

6.4 Verlauf der Magnetisierung bei vertikaler Erregung

6.4.1 Übergang von einer ein- zu einer mehrdomänigen Konfiguration

Der Fall, daß das externe Feld um 90° verkippt, senkrecht zur uniaxialen Richtung liegt, ist für die Anwendung auf das Beispiel eines magnetoresistiven Sensors von Interesse. Im folgenden werden daher Untersuchungen von dieser Art der Erregung vorgestellt. Hierzu wird, von der eindomänigen Konfiguration des Spreizzustandes ausgegangen, die jungfräuliche Magnetisierungskurve begonnen und das System in Sättigung getrieben. Im Anschluß daran wird das Feld bis zum Schaltfeld reduziert. Das Ergebnis ist in [Bild 6.24](#) dargestellt.

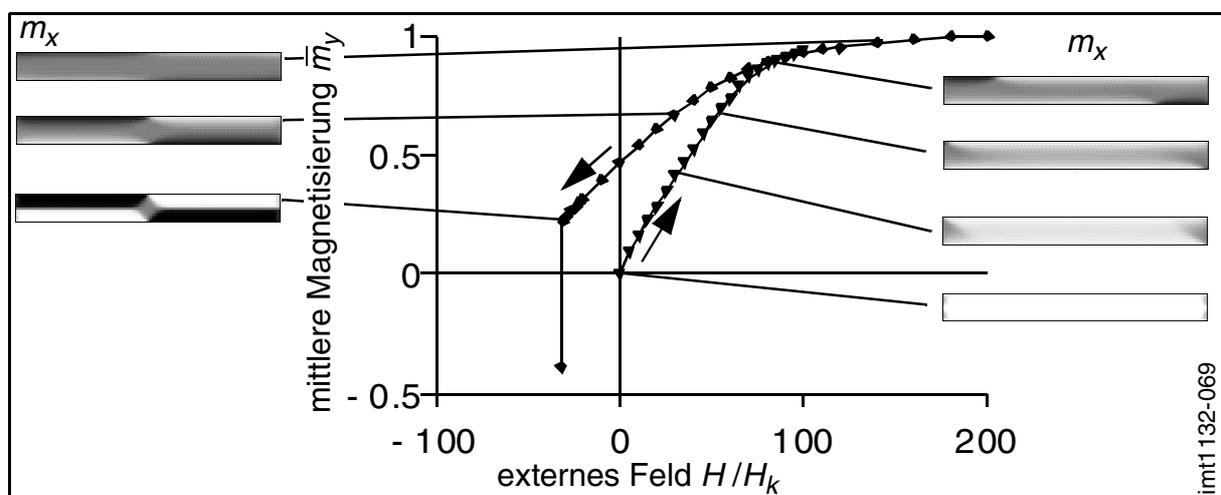


Bild 6.24: Magnetisierungskurve eines bis in Sättigung gebrachten Streifens (Variante 2, $L = 2 \mu\text{m}$)

Man erkennt, daß der Spreizzustand in der Ausgangslage, wie auch in Kapitel 6.3.1 gezeigt wurde, so instabil ist, daß er sofort bei einem anliegenden externen Feld symmetriebrechend von einer S-Konfiguration abgelöst wird. Bei weiterer Erhöhung rotieren die Magnetisierungen langsam aus ihrer Lage in Richtung des Feldes heraus. Bei einer bestimmten Feldstärke wird nun der S-Zustand abgelöst von einer, am Anfang sehr schwach ausgeprägten und verzerrten, Rautenstruktur. Der Keim dieses Vorganges liegt in den Ecken des Streifens. Nachdem sich die verzerrte Rautenstruktur ausgebildet hat, wandert der Punkt der Symmetrie, d.h. der Punkt, an dem die Magnetisierungen an der oberen und unteren Kante entgegengesetzt liegen, in das Zentrum des Streifens. Ist das externe Feld groß genug, wird die Rautenstruktur überwunden, und das System geht in den gesättigten Zustand über. Das kritische Feld, bei dem der Übergang vom S-Zustand in die verzerrte Raute auftritt, läßt sich extrapolieren, wenn man den Punkt der Symmetrie über das externe Feld aufträgt. Bild 6.25 zeigt den entsprechenden Kurvenverlauf. Das kritische Feld läßt sich zu $74,1 H_k$ berechnen.

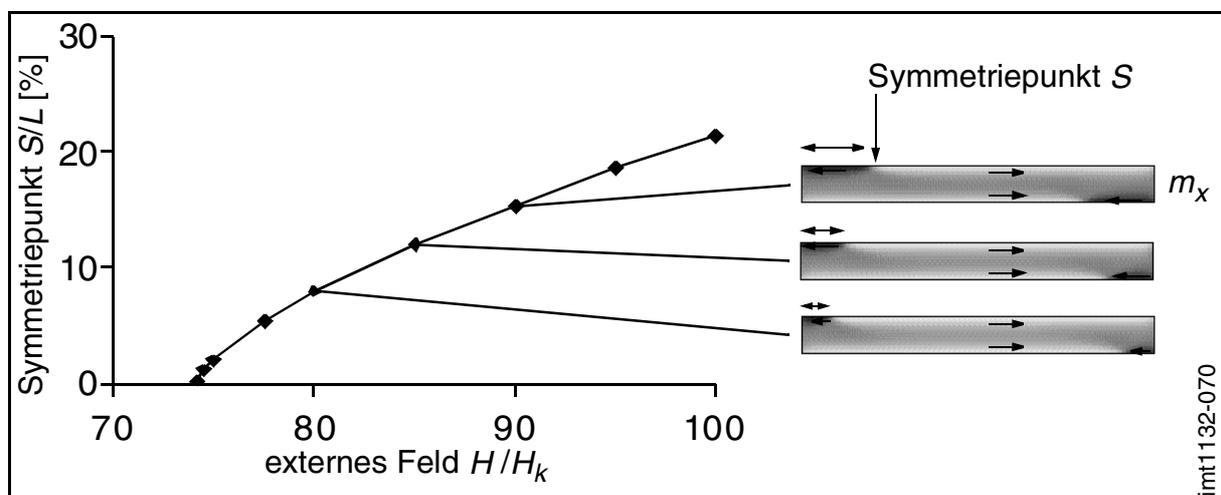


Bild 6.25: Punkt der Symmetrie beim einem Übergang von einer Rautenstruktur in den S-Zustand

Der Verlauf der Magnetisierungskurve sieht deutlich anders aus, wenn das System nicht vollständig in Sättigung getrieben wird, sondern das externe Feld reduziert wird, bevor es das kritische Feld erreicht. In diesem Fall kommt es nicht zu dem Übergang in die Rautenstruktur, sondern der eindomnige Zustand bleibt erhalten. Beim Reduzieren des Feldes behält das System auch die eindomnige Struktur. Aller-

dings ist, wie bereits in Kapitel 6.2.6 verdeutlicht wurde, der Sprezzzustand nicht stabil für die Länge von $2 \mu\text{m}$. Der sich einstellende S-Zustand weist ein schwach ausgeprägtes asymmetrisches Schalten auf. Dies läßt sich in [Bild 6.26](#) erkennen. Man sieht, daß bei Reduzierung des Feldes ausgehend von $70 H_k$, d.h. leicht unterhalb des kritischen Feldes von $74,1 H_k$, die Magnetisierung kontinuierlich sinkt. Verschwindet das externe Feld, bleibt eine remanente, sehr schwache Magnetisierung in Y-Richtung erhalten. Dies liegt daran, daß sich der S-Zustand eingestellt hat und dieser eine leichte Orientierung in Y-Richtung aufweist. Reduziert man nun weiterhin das Feld, gelangt man zu dem Punkt, an dem die S-Konfiguration von einer positiven in eine negative Ausrichtung schaltet. Wie bereits erwähnt, läßt sich die Konfiguration nach einem Schaltvorgang durch statische Simulationen nicht genau vorhersagen. In diesem Fall ist der Schaltprozess sehr schwach ausgeprägt und eindeutig, so daß mit extrem geringer Schrittweite des externen Feldes eine zufriedenstellende Lösung erwartet werden kann. Die Magnetisierungskurve wurde daher auch im negativen fortgesetzt.

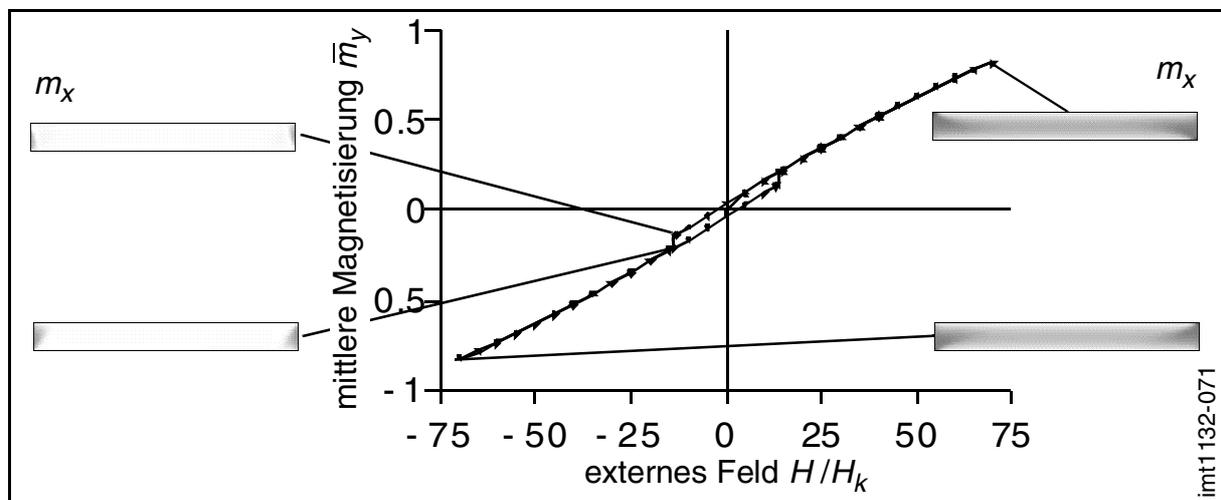


Bild 6.26: Magnetisierungskurve nach Erregung unterhalb des kritischen Feldes

6.4.2 Magnetisierungsverlauf für verschiedene Längenverhältnisse

Im vorherigen Kapitel wurden die Untersuchungen am Beispiel der Variante 2 mit dem Längenverhältnis von 10:1 durchgeführt. Im folgenden soll der Verlauf der mittleren Magnetisierung auch für die Variante 1 mit einem Längenverhältnis von 2:1 ermittelt werden. Zusätzlich wird ein Modell untersucht, das bislang nicht spezifiziert wurde. Es entspricht in allen Eigenschaften den Varianten 1 und 2 mit dem Unterschied, daß

das Längenverhältnis zu 7:1 festgelegt wurde. Dieses Modell wird im folgenden Variante 3 genannt. In [Bild 6.27](#) werden die Verläufe der mittleren Magnetisierung der drei erwähnten Varianten dargestellt.

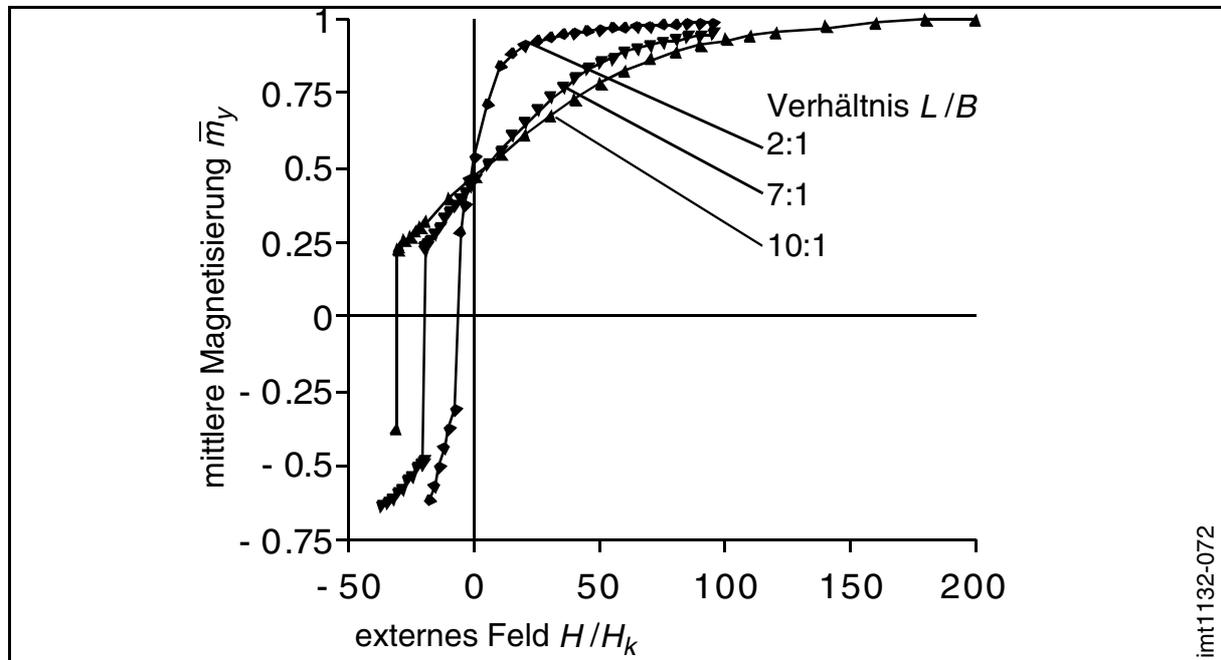


Bild 6.27: Verlauf der mittleren Magnetisierung nach vorhergehender Sättigung, für verschiedene Längenverhältnisse

Bei diesen Kurven wurde von einem in Y-Richtung gesättigten Zustand ausgegangen, d.h. der Zustand bei einem starken, externen Feld. Die Hysteresekurven weisen ein deutlich unterschiedliches Verhalten auf. Sowohl die Koerzitivität unterscheidet sich, als auch das Verhalten beim Entmagnetisieren. Diese Unterschiede können wie folgt erklärt werden. Durch die hohe Formanisotropie bei großen Längenverhältnissen, ist es deutlich schwieriger, die Magnetisierung senkrecht zur uniaxialen Richtung zu halten. Dies bedeutet, daß sie sich bei der Verringerung des externen Feldes früher entlang der langen Achse ausrichten und zu einem schnelleren Abfallen der Kurve führen. Die Restmagnetisierung, die kurz vor dem Schaltpunkt gehalten wird, rührt von dem Zentrum der Rautenstruktur her. Dieses Zentrum wird zwischen den entgegengesetzt magnetisierten Gebieten festgehalten. Beim Schaltvorgang muß sich die gesamte Anordnung umorientieren. Hierbei müssen Bereiche, die in der bevorzugten Lage entlang der langen Achse liegen, aus dieser herausrotieren, um den Schaltvorgang einzuleiten. Eine hohe Formanisotropie verzögert diesen Vorgang

dadurch, daß jede Bewegung aus der Vorzugsrichtung heraus mit einem erheblichen Anstieg der Energie bestraft wird. Bei Erreichen des Schaltpunktes überwiegt die Energie des externen Feldes und es kommt zu einem Schalten. Die Koerzitivität ist bei hohen Längenverhältnissen größer, da die Energie des externen Feldes höher sein muß, um die ebenfalls höhere Formanisotropieenergie zu überwinden.

Wie bereits in Kapitel 6.4.1 gezeigt wurde, gibt es bei der Aufmagnetisierung aus einer eindomänigen, in uniaxialer Richtung gesättigten Konfiguration, ein kritisches Feld, bei dem die Einzeldomäne gebrochen wird. Die Magnetisierungsverläufe, die entstehen, falls das externe Feld reduziert wird, bevor es das kritische Feld erreicht, werden für die drei Varianten in [Bild 6.28](#) dargestellt. Auch hier weisen die Magnetisierungsverläufe unterschiedliches Verhalten auf. Die Erklärung hierfür ist dieselbe wie die zuvor genannte.

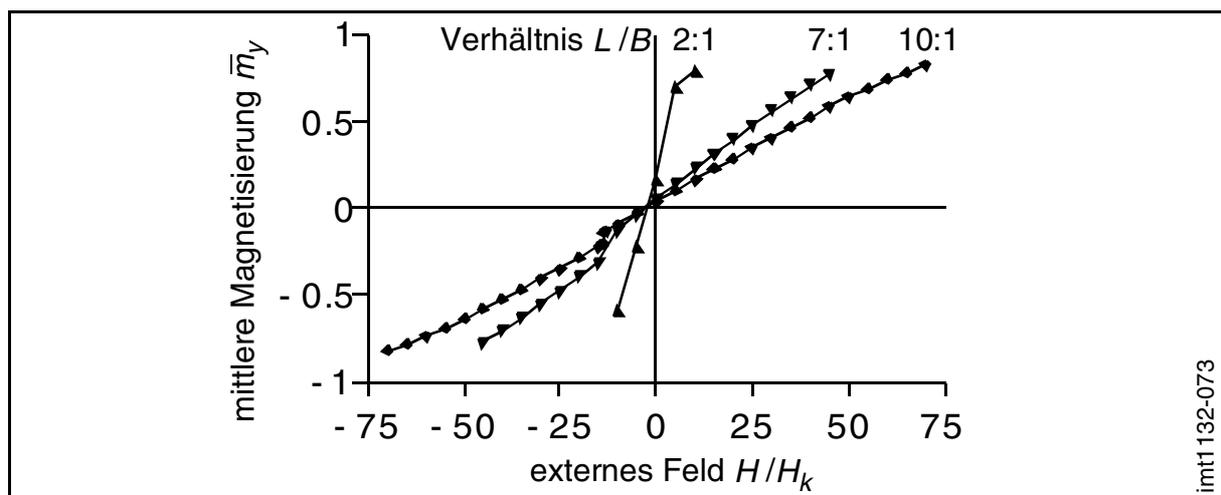


Bild 6.28: Magnetisierungskurven nach Erregung unterhalb des kritischen Feldes

6.5 Magneto-resistive Eigenschaften

Wie bereits am Anfang dieses Kapitels erwähnt, werden in der Sensortechnik dünne Schichten mit einem relativ hohen Aspektverhältnis zwischen Länge und Breite verwendet, um eine hohe Formanisotropie zu erlangen. Dies ist notwendig, um die Voraussetzung für die Nutzung des magneto-resistiven Effektes zu schaffen. Diese ist, daß eine einheitliche Magnetisierungskonfiguration erreicht werden muß, um den Effekt zu maximieren. Der günstigste Fall ist eine eindomänige Struktur, die, bei gezielter Erregung durch ein externes Feld, einen hysteresefreien Magnetisierungsver-

lauf aufweist. Die Theorie des magnetoresistiven Effektes wurde in Kapitel 2.6 bereits vorgestellt. Nun soll an dem Beispiel einer dünnen Schicht, mit der Geometrie aus Variante 2 und der Kantenlänge von $2\ \mu\text{m}$, diese Eigenschaft berechnet werden. Das Hystereseverhalten dieser Struktur wurde bereits in [Bild 6.28](#) vorgestellt. Mit diesen Ergebnissen läßt sich die Orientierung und somit auch der elektrische Widerstand (siehe Gleichung 2.39) jeder diskretisierten Magnetisierung berechnen und mitteln. Trägt man diesen gemittelten Widerstand in Abhängigkeit des reduzierten Feldes H/H_k auf, kann man die Auswirkung auf das magnetoresistive Verhalten von unterschiedlichen Konfigurationen untersuchen. [Bild 6.29](#) zeigt eine solche Kurve für den in Kapitel 6.4 vorgestellten Fall, daß ein vertikales Feld das System in Y-Richtung in Sättigung treibt und danach das Feld reduziert wird. Es ist zu erkennen, daß auch die Kurve der Magnetoresistivität eine Hysterese aufweist. Dies ist für die praktische Anwendung unerwünscht, läßt sich in diesem Fall jedoch kaum verhindern. Diese Ergebnisse decken sich auch mit Beobachtungen von praktischen Messungen [MCC97]. Beispielsweise wird von Herstellern von magnetoresistiven Sensoren gefordert, die Magnetisierung in Längsrichtung auszurichten. Dies kann durch das Anlegen eines von einem Hartmagneten erzeugten Stützfeldes oder durch eine eingebettete Spule zur Magnetfelderzeugung geschehen. Die erstgenannte Lösung ist die gebräuchlichste. Mit dieser Methode wird eine mehrdomänige Struktur, welche dann auch bei geringen Feldern vorherrscht, wieder durch eine eindomänige Struktur ersetzt. Eine weitere Möglichkeit ist, durch eine hohe Formanisotropie die Wahrscheinlichkeit zu verringern, daß sich mehrdomänige Zustände einstellen [SCH99].

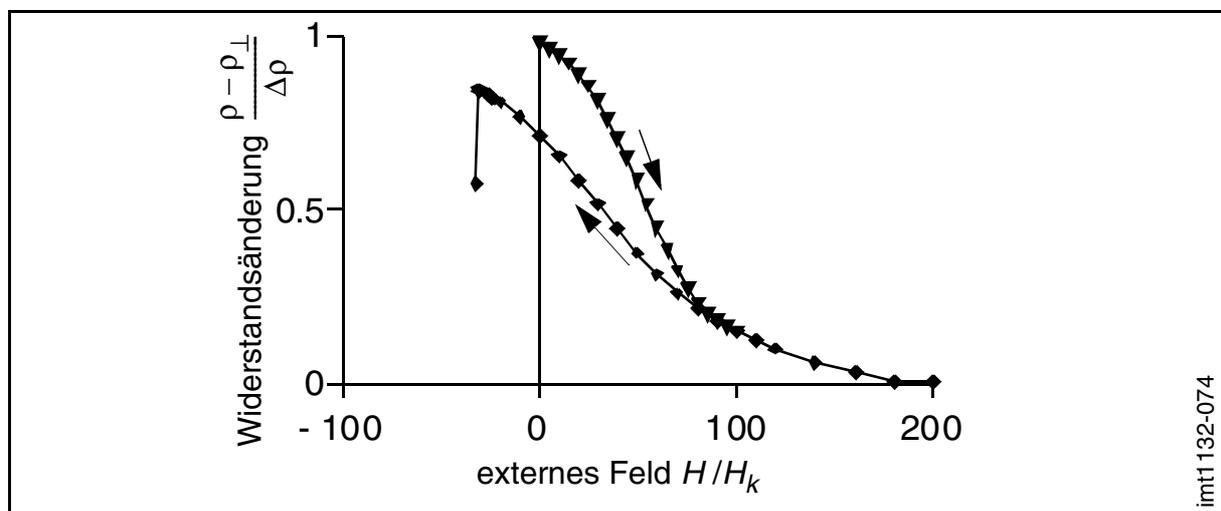


Bild 6.29: Verlauf der Widerstandsänderung nach vorangegangener Sättigung

Wird das System nicht vollständig in Sättigung getrieben, sondern unterhalb des kritischen Feldes aus Kapitel 6.4.1 erregt, ist eine Hysterese nur durch das asymmetrische, schwach ausgeprägte Schalten des S-Zustandes zu erkennen. Bild 6.30 zeigt den Verlauf des magnetoresistiven Widerstandes. Es wird deutlich, daß nun der Verlauf den vereinfachten Rechnungen aus Kapitel 2.6 stark ähnelt. Der Schaltvorgang läßt sich aber auch in dieser Kurve dadurch erkennen, daß ein Sprung in der Kurve sichtbar ist, welcher auch eine leichte Hysterese hervorruft.

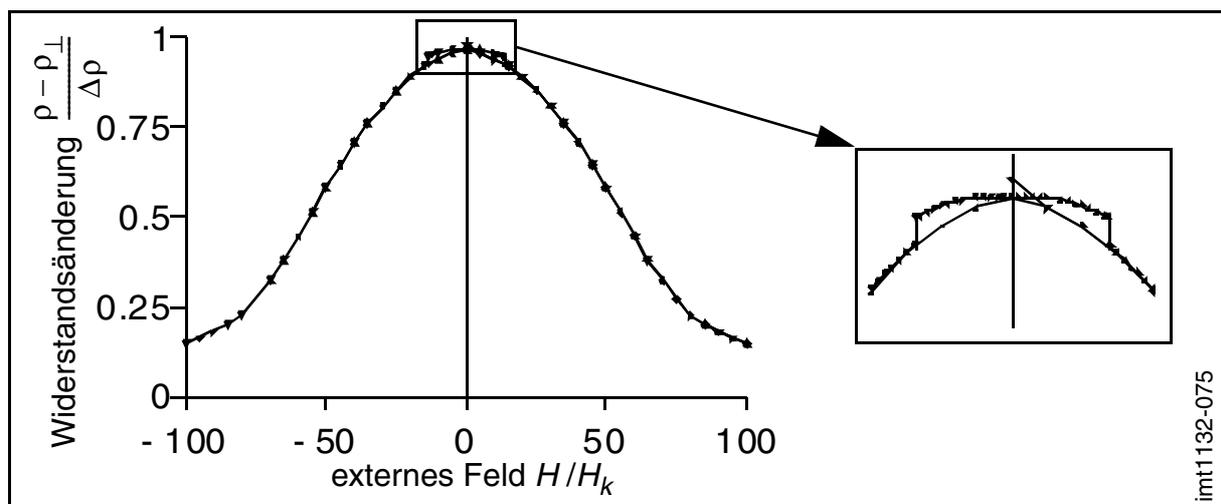


Bild 6.30: Widerstandsänderung bei Betrieb unterhalb des kritischen Feldes

Diese Hysterese ist allerdings dort, wo die Steigung am höchsten ist, sehr gering und somit für praktische Anwendungen nicht spürbar. Verwendet man nun, wie beispielsweise bei einem dualen, magnetoresistiven Sensor, zwei Schichten und richtet die Magnetisierungsverteilung so aus, daß sie in dem sensitivsten Bereich liegt, erhält man die Charakteristik der Kurve in Bild 6.31 a. Hierbei wurden die Signale in den Bereichen höchster Sensitivität differentiell abgegriffen. Das Feld der höchsten Sensitivität wurde berechnet, indem das Maximum der Steigung der Widerstandsänderung ermittelt wurde (Bild 6.31 b). Sie beträgt für das entsprechende Beispiel $60 H_K$. Dies bedeutet, daß ein vom Sensorstrom selbst erzeugtes Feld diese Feldstärke aufweisen sollte, um den Sensor zu linearisieren. Man kann erkennen, daß die Kennlinie eine hohe Linearität aufweist. Die Sensitivität des Sensors konnte durch die differentiell Verwendung zweier Schichten verdoppelt werden.

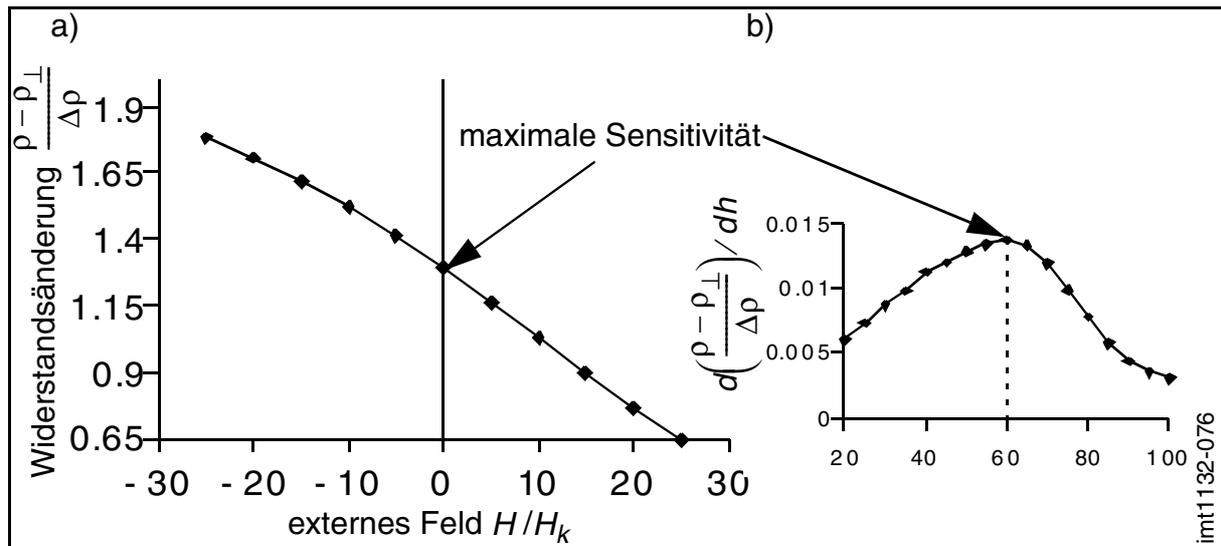


Bild 6.31: a) Kennlinie eines dualen, magnetoresistiven Sensors und b) die Steigung der Widerstandsänderung zur Bestimmung der maximalen Sensitivität

Um die Abhängigkeit des Längenverhältnisses auf die magnetoresistiven Eigenschaften zu verdeutlichen, werden ausgehend von den Ergebnissen aus Kapitel 6.4.2 die entsprechenden Kurven in [Bild 6.32](#) dargestellt.

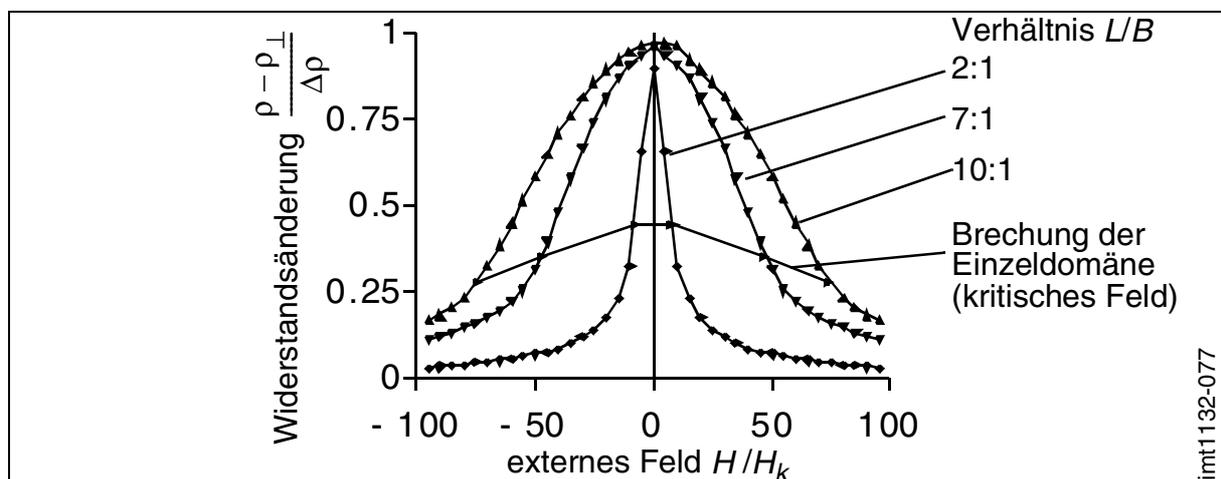


Bild 6.32: Widerstandsänderung bei Betrieb unterhalb des kritischen Feldes für verschiedene Längenverhältnisse

Diese Kurven ergeben sich aus den Magnetisierungsverläufen, falls das externe Feld das kritische Feld aus Kapitel 6.4.2 nicht übersteigt. Um die gewohnte Charakteristik des Verlaufs der magnetoresistiven Änderung zu erhalten, wurden die Kurven

oberhalb des kritischen Feldes fortgeführt. Zusätzlich wurde das kritische Feld als eigene Kurve hinzugefügt. Vergleicht man nun die Kurven miteinander, läßt sich nicht eindeutig feststellen, welches Längenverhältnis zu den besten Eigenschaften führt. Einerseits sinkt die Sensitivität mit Zunahme des Längenverhältnisses. Andererseits ist das kritische Feld bei geringen Längenverhältnissen so gering, daß bei einem praktischen Einsatz der Meßbereich erheblich eingeschränkt wird. Oberhalb des kritischen Feldes läßt sich nicht vermeiden, daß das magnetoresistive Verhalten eine höhere Hysterese aufweist, wie bereits in Bild 6.29 gezeigt werden konnte.

7 Simulation von kleinen Würfелеlementen

Im Gegensatz zu den in Kapitel 6 vorgestellten mikromagnetischen Untersuchungen an dünnen Schichtstrukturen, sollen in diesem Kapitel kleine Würfелеlemente untersucht werden. Der Anwendungsbezug solcher kleinen Teilchen ist die Speichertechnik. Hier wird die Ausrichtung der Magnetisierung genutzt, um Daten zu speichern. Dazu ist es erforderlich, daß eindeutig zwischen zwei Magnetisierungsrichtungen gewechselt werden kann. Dies entspricht den in diesem Kapitel untersuchten Schaltvorgängen. Bei der Geometrie der untersuchten Teilchen handelt es sich um Würfel, wie Bild 7.1 zu entnehmen ist. Wie schon bei den dünnen Schichten findet auch diese Geometrie ihren Ursprung in einem Benchmarkproblem, welches von der NIST (National Institute for Standards and Technology) [NIS98] vorgeschlagen wurde.

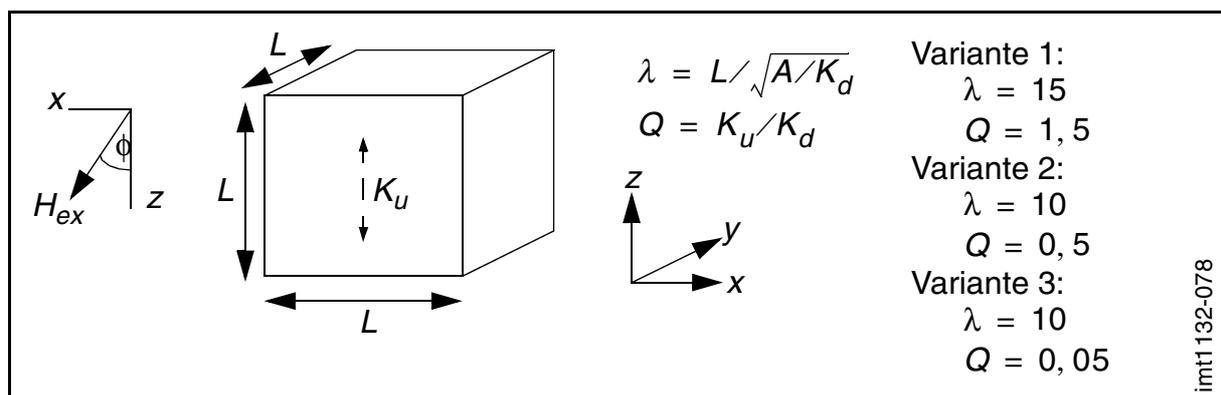


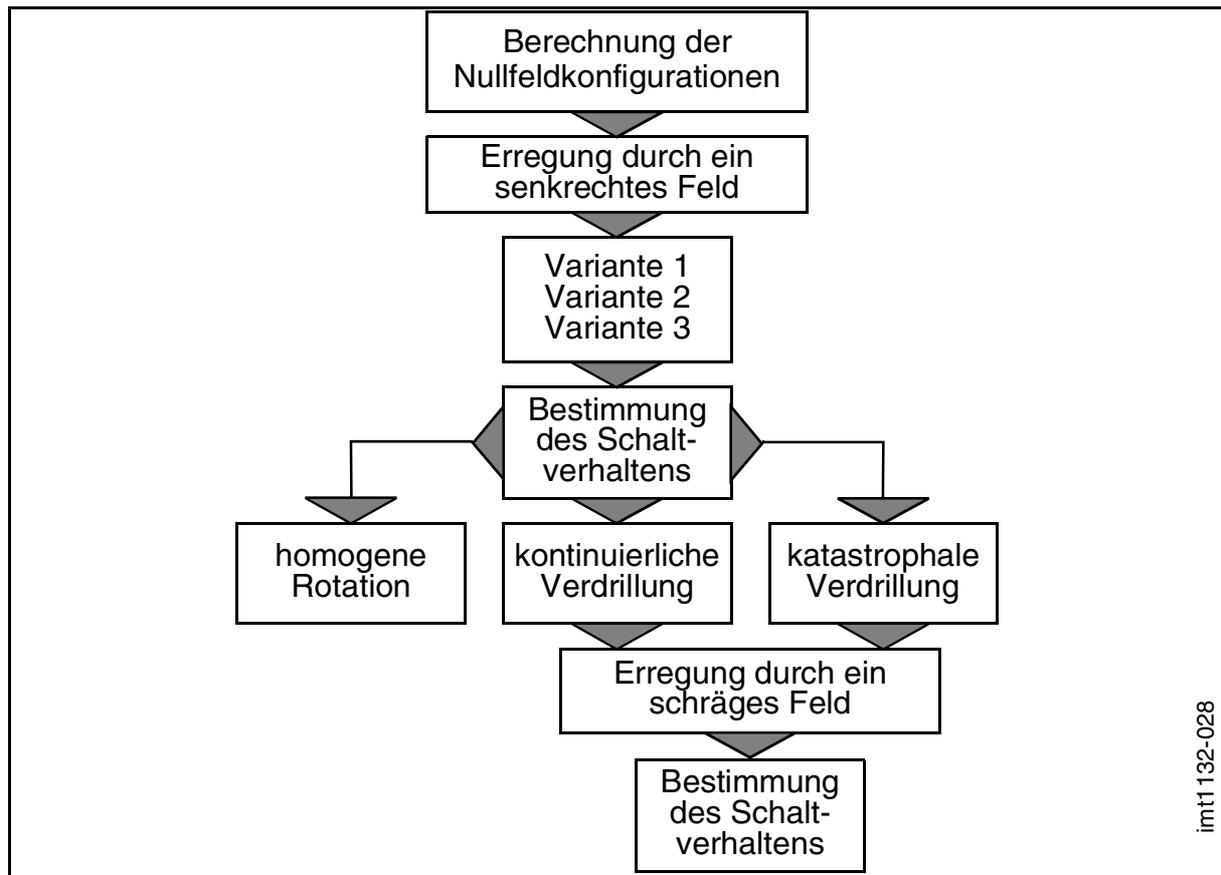
Bild 7.1: Parameter der verwendeten kleinen Teilchen; Variante 1, 2 und 3

Bei ihnen liegt die Anisotropieachse vertikal in Z-Richtung. Die Länge der drei Kanten ist L , bzw. als reduzierte Größe bezeichnet als λ , mit $\lambda = L / \sqrt{A / K_d}$. A ist hierbei die Austausch-StEIFIGKEITSkonstante. Die Austauschlänge, auf die reduziert wird, liegt beispielsweise für Permalloy bei $\sqrt{A / K_d} = 10,1 \text{ nm}$. Die Materialeigenschaft wird durch Q ausgedrückt, mit $Q = K_u / K_d$ und einer uniaxialen Anisotropiekonstante K_u und $K_d = J_s^2 / (2\mu_0)$ als die Streufeldkonstante. Die Kombination dieser Parameter führt zu mehreren möglichen Konfigurationen der Magnetisierungen und im Gegensatz zu dünnen Schichten zu einem anderen Verhalten bei Erregung durch ein externes Feld. Aus diesem Grund sind bei der simulationstechnischen Untersuchung solcher Strukturen auch andere Methoden erforderlich. Ausgangspunkt der systematischen Untersuchungen sind die magnetischen Grundkonfigurationen. Sie werden im einzelnen vorgestellt und führen zu einem Phasendiagramm [RAV98a], wel-

ches die Einordnung der Grundkonfigurationen in Abhängigkeit der Parameter Q und λ ermöglicht. Folgend wird das Schaltverhalten einiger Strukturen bei einem senkrechten Feld untersucht. Dies geschieht in Anlehnung an die bereits vorgestellten Schaltvorgänge kleiner ellipsoider Teilchen im *Stoner-Wohlfarth* Modell in Kapitel 2.5. Weiterhin wird der Übergang von einem senkrechten Feld zu einem schrägen Feld untersucht. Hierbei ist von besonderer Bedeutung, ob das symmetrische Schalten durch Symmetriebrechung von einem asymmetrischen Schalten abgelöst wird. Dieser Vorgang würde zu einer deutlichen Veränderung des Schaltprozesses führen. Die Untersuchungen werden an drei unterschiedlichen Beispielen demonstriert (Bild 7.2). Variante 1 stellt hierbei ein Teilchen mit hohem Q und großem λ dar ($Q = 1,5$ und $\lambda = 15$). Variante 2 hingegen besitzt ein geringeres Q und leicht geringeres λ ($Q = 0,5$ und $\lambda = 10$). Bei Variante 3 wird das Q erneut verringert, λ jedoch konstant gehalten ($Q = 0,05$ und $\lambda = 10$). Alle drei Beispiele sind so gewählt, daß sich unterschiedliche Schaltvorgänge ergeben. Das externe Feld liegt beim Ausgangszustand in Richtung der uniaxialen Achse, d.h. entlang der Z-Achse. Die Verkipfung des Feldes erfolgt in der XZ-Ebene. Der Winkel zwischen der Z-Achse und dem externen Feld wird ϕ genannt.

7.1 Vorgehensweise

Die Vorgehensweise bei der Simulation kleiner Würfelemente ist in Bild 7.2 dargestellt. Wie auch bei der Simulation dünner Schichtstrukturen wird hier mit der Berechnung der Nullfeldkonfigurationen begonnen. Es folgt die Erregung durch ein senkrecht Feld. Hierbei werden drei Varianten näher untersucht und ihr Schaltverhalten bestimmt. Die Varianten sind so zu wählen, daß unterschiedliche Schaltverhalten auftreten können. Dies sind die *homogene Rotation*, die *kontinuierliche Verdrillung* und die *katastrophale Verdrillung*. Anschließend wird das externe Feld geneigt und die Auswirkung auf die Schaltvorgänge, bei denen eine Verdrillung auftritt, untersucht. Es folgt eine erneute Bestimmung des Schaltverhaltens.



imt1 132-028

Bild 7.2: Simulation kleiner Würfелеlemente

7.2 Magnetische Grundkonfigurationen ohne externe Erregung

Wie auch bei der Untersuchung dünner Schichtstrukturen in Kapitel 6, sollen in diesem Kapitel die sogenannten „Nullfeld-Konfigurationen“, d.h. die metastabilen Zustände ohne externe Erregung, vorgestellt werden. Die mögliche Anzahl der relevanten Zustände ist gering. Sie werden im folgenden beschrieben.

7.2.1 Spreizzustand

Der Spreizzustand ist die einzige eindomänige Konfiguration bei kleinen Teilchen. Bei diesem Zustand, siehe [Bild 7.3](#), liegt der überwiegende Teil der Magnetisierungen parallel zu einer der Achsen des Würfels. Vorzugsweise ist dies die uniaxiale Anisotropieachse. Lediglich an den Enden spreizen sich die Magnetisierungen auf. Der Spreizzustand besitzt im allgemeinen eine symmetrische Anordnung. Ein schräg liegendes, externes Feld ($\phi \neq 0$) kann diese Symmetrie brechen. Liegt ein externes Feld an, welches die Magnetisierungen zu einer Ausrichtung in Richtung des Feldes zwingt, so tritt ebenfalls der Spreizzustand auf. Die Aufspreizung an den Enden kann je nach

Stärke und Richtung des Feldes unterschiedlich stark ausgeprägt sein.

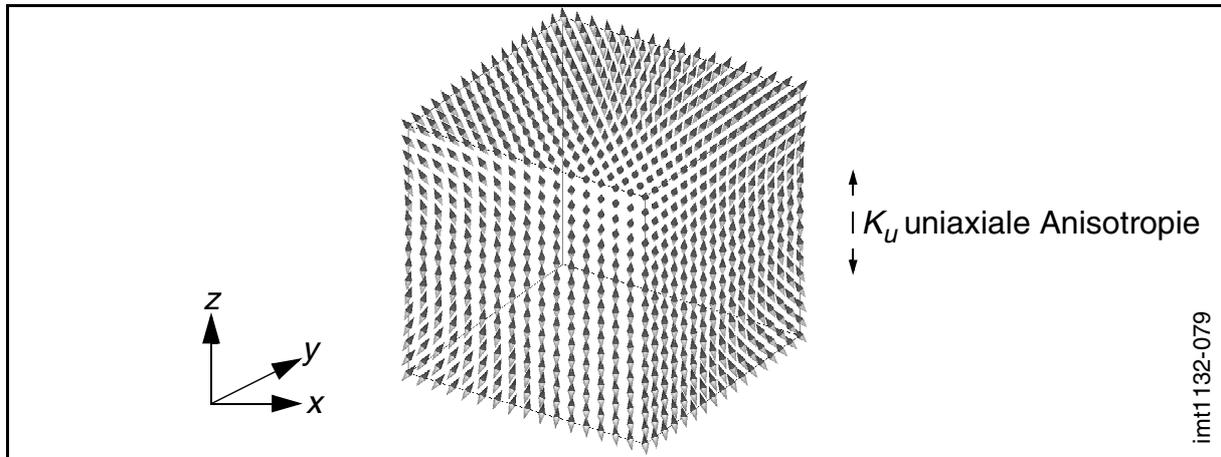


Bild 7.3: Sprezzzustand, für $Q = 0.005$ und $\lambda = 9$ (Seitenflächen)

7.2.2 Symmetrischer Wirbel (Vortex)

Im Gegensatz zum Sprezzzustand, bei dem die an der Oberfläche austretenden Magnetisierungen zu einer hohen Streufeldenergie führen, werden bei einer Wirbelkonfiguration (Vortex) die Oberflächenstrefelder reduziert. In **Bild 7.4 a** ist ein solcher Wirbel in einer symmetrischen Form dargestellt. Man erkennt, wie sich die Magnetisierungen zu einem Wirbel verdrillen. Der Wirbel besitzt eine Rotationsachse, die symmetrisch im Zentrum des Würfels liegt (**Bild 7.4 b**). Diese Achse kann entlang einer der Raumrichtungen liegen. Man unterscheidet in diesem Fall zwischen einem X-, Y- oder Z-Wirbel.

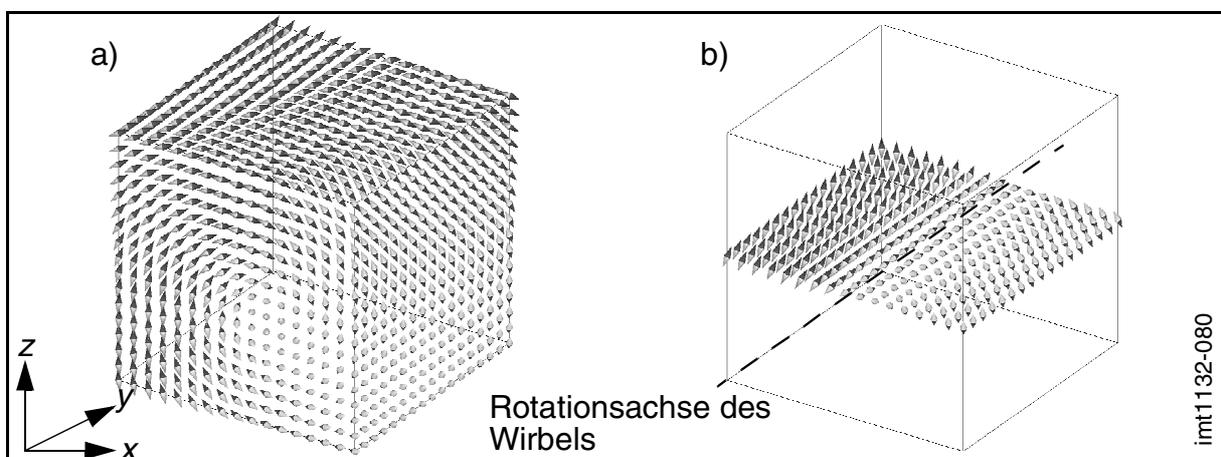


Bild 7.4: Symmetrischer Wirbel, für $Q = 0.005$ und $\lambda = 8$; a) Seitenflächen und b) mittlere XY-Fläche

7.2.3 Asymmetrischer Wirbel (Vortex)

Die in Kapitel 7.2.2 beschriebene Symmetrie des Wirbels kann für bestimmte Parameter gebrochen werden. In diesem Fall stellt sich ein asymmetrischer Wirbel ein und das Rotationszentrum des Wirbels liegt nicht symmetrisch entlang einer der Raumrichtungen des Würfels, sondern kann eine beliebige Form annehmen, wie in [Bild 7.5](#) dargestellt. In der Darstellung der mittleren XY-Fläche erkennt man, daß das Zentrum des Wirbels entlang einer Kurve verläuft. Diese Kurve ist nicht unbedingt eine Gerade und die Enden können an unterschiedlichen Positionen an die Oberfläche treten. Diese einfachen Wirbel sind zweidomänige Konfigurationen.

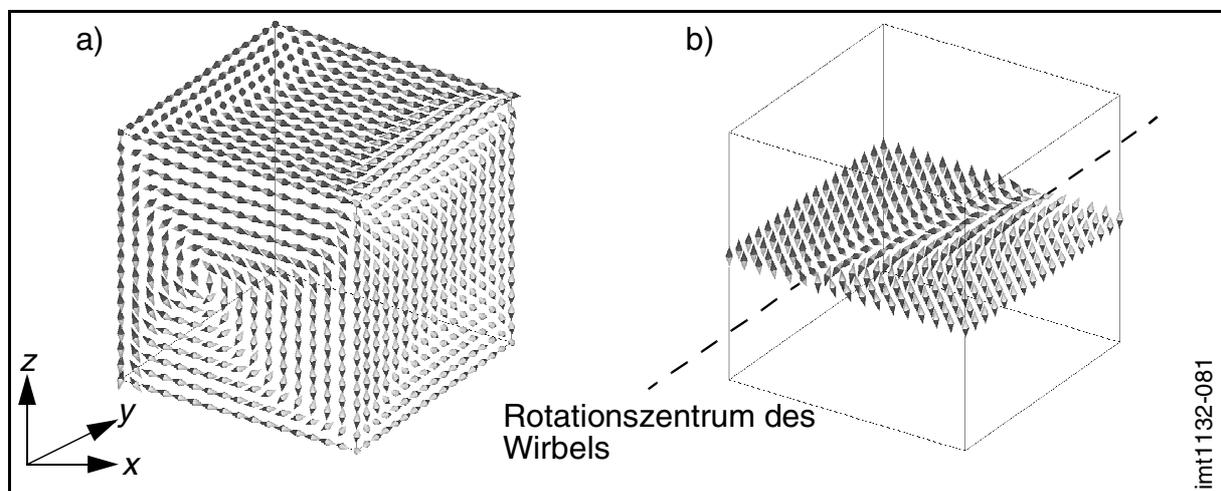


Bild 7.5: Symmetrischer Vortex, für $Q = 0.001$ und $\lambda = 70$; a) Seitenflächen und b) mittlere XY-Fläche

7.2.4 Mehrdomänige Wirbelkonfigurationen

Es können auch Konfigurationen mit mehr als zwei Domänen auftreten. Ein Beispiel einer dreidomänigen Struktur ist der Doppelwirbel, dargestellt in [Bild 7.6](#). Es gibt diesen in unterschiedlicher Ausprägung. Gezeigt ist ein Doppelwirbel, bei dem die Zentren der Wirbel symmetrisch angeordnet sind. Die Richtung der Wirbel ist beliebig, entlang einer der Raumrichtungen des Würfels, denkbar.

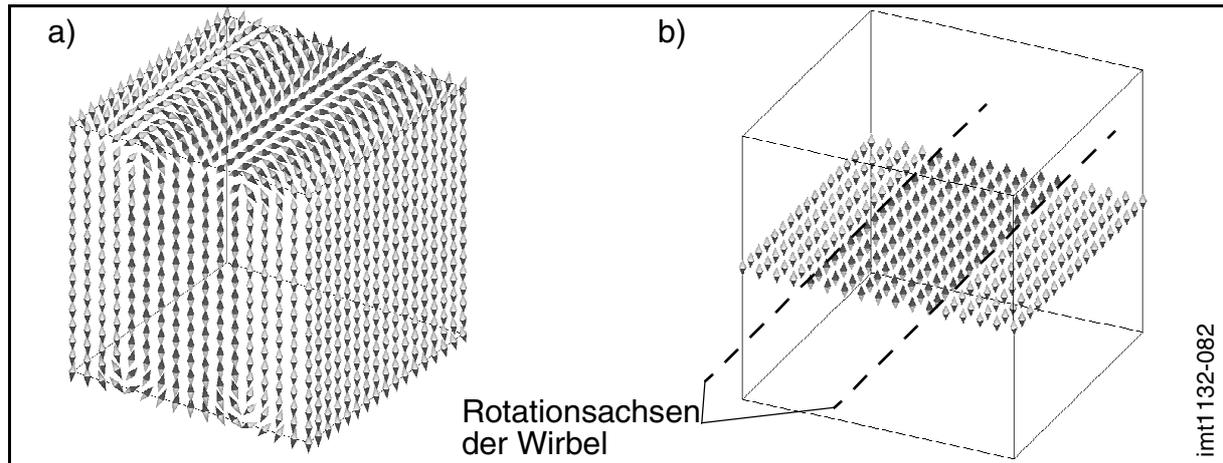


Bild 7.6: Symmetrischer Doppelwirbel, für $Q = 0.5$ und $\lambda = 55$ a) Seitenflächen und b) mittlere xy-Fläche

Auch bei diesen höher dimensionierten Domänen können asymmetrische Domänenkonfigurationen auftreten. Ein Beispiel hierfür ist in **Bild 7.7** dargestellt. Man erkennt, daß die Zentren der Wirbel entlang einer Kurve liegen, deren Enden an benachbarten Seitenflächen heraustreten.

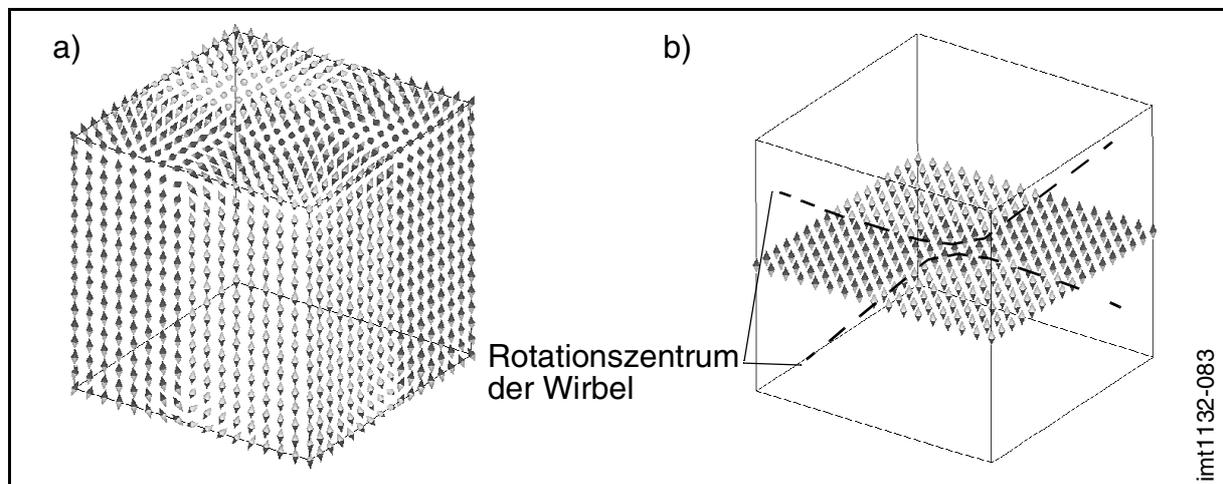


Bild 7.7: Asymmetrischer Doppelwirbel, für $Q = 0.5$ und $\lambda = 55$ a) Seitenflächen und b) mittlere xy-Fläche

7.2.5 Phasendiagramm der Grundkonfigurationen

Bestimmt man für die Parameter Q und λ die stabilsten Zustände, so läßt sich ein Phasendiagramm entwickeln [RAV98a]. In diesem lassen sich die Übergänge von dem eindomänigen Zustand in den mit zwei Domänen und von diesem in den mehrdomäni-

gen Zustand mit den entsprechenden Phasengrenzen bestimmen. Bild 7.8 zeigt ein solches Phasendiagramm. Man erkennt, daß für kleine Längen λ , unabhängig von Q , der eindomänige Spreizzustand auftritt.

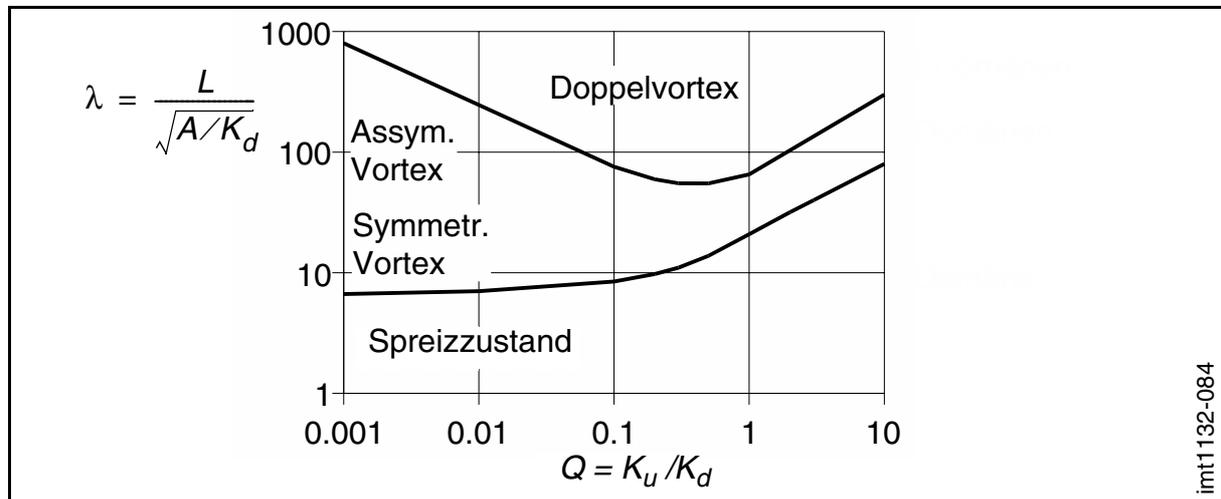


Bild 7.8: Phasendiagramm für die Grundkonfigurationen eines Würfels mit uniaxialer Anisotropie, ohne äußeres Feld [RAV98a]

Bei zunehmender Länge tritt der zweidomänige symmetrische Wirbel auf. Bei einer weiteren Erhöhung wird die Symmetrie des Wirbels gebrochen und schließlich treten auch mehrdomänige Konfigurationen auf.

7.3 Schaltvorgänge im senkrechten Feld

Die in Kapitel 2.5 beschriebenen Ellipsoide des *Stoner-Wohlfarth* Modells besaßen die Einschränkung einer homogenen Magnetisierung und der hiermit verbundenen Freiheit von Volumenladungen. Im folgenden soll gezeigt werden, daß die Methoden zur Bestimmung der Schaltvorgänge auch auf einige Würfelstrukturen angewendet werden können. Diese Untersuchungen können mittels mikromagnetischer Simulation erfolgen. Die Problematik ist jedoch, daß der exakte Schaltpunkt nur gefunden werden kann, wenn bei der Simulation ein Übergang von einem Energieminimum in ein benachbartes vorliegt. Da mehrere Energieminima sehr nahe beieinander liegen, kann aufgrund des numerischen Rauschens nicht gewährleistet werden, daß beim Schalten ein Energieminimum überschritten wird. Folglich läßt sich der exakte Schaltpunkt nicht bestimmen. Um diese Unsicherheit während des Schaltens zu umgehen, ist es erforderlich, durch Festlegen von Nebenbedingungen gewisse Konfigurationen

zu erzwingen und für speziell diese den Schaltpunkt zu bestimmen. Die Konfiguration mit dem höchsten Schaltpunkt ist dann die bevorzugte. Um eine Eindeutigkeit bei den untersuchten Schaltvorgängen zu erhalten, wurden geringe Kantenlängen ($\lambda < 20$) bei den Varianten 1 bis 3 verwendet. Somit wird gewährleistet, daß nur ein- oder zweidomänige Zustände auftreten können. Die mehrdomänigen Konfigurationen sind erst bei deutlich höheren Kantenlängen stabil. Ein wahrscheinlicher Schaltvorgang ist die „homogene Rotation“, d.h. das Schalten vom positiven Spreizzustand direkt in einen gegenüberliegenden negativen Spreizzustand. Dies kann entweder asymmetrisch über eine Kante hinweg oder symmetrisch über alle Ecken und Kanten geschehen. Ein weiterer möglicher Schaltvorgang ist die „kontinuierliche Verdrillung“, d.h. ein gleichmäßiger Übergang vom gesättigten Spreizzustand über einen Wirbel als Zwischenkonfiguration in den negativen, gesättigten Spreizzustand. Als letztes wird die „katastrophale Verdrillung“ untersucht, welche sich von der kontinuierlichen dadurch unterscheidet, daß der Übergang vom Spreizzustand in den Wirbel unangekündigt auftritt.

7.3.1 Homogene Rotation

Die homogene Rotation besitzt bei einem hohen externen Feld als Ausgangskonfiguration den Spreizzustand. Bei der Reduzierung des Feldes kommt es zu einer kontinuierlichen Rotation der Magnetisierungen. Das System schaltet direkt in einen entgegengesetzten Spreizzustand, ohne eine Zwischenkonfiguration zu durchlaufen. Um diesen Schaltvorgang simulationstechnisch zu untersuchen, muß verhindert werden, daß ein Wechsel in eine andere Konfiguration stattfindet. Dies geschieht durch die geeignete Wahl einer Einschränkungsbedingung. Sie wird so gewählt, daß die unerwünschte Konfiguration des Wirbels verhindert wird. Bild 7.9 zeigt die Magnetisierungen, die in Ihrer Bewegung eingeschränkt werden müssen. In dem Fall eines senkrecht liegenden externen Feldes werden diese Magnetisierungen vollständig in Ihrer Bewegung eingeschränkt und liegen somit in Z-Richtung. Bei einem schrägen Feld muß die eben erwähnte, starke Einschränkungsbedingung gelockert werden, damit die Magnetisierungen dem externen Feld folgen können. Hierbei wird eine Rotation der Magnetisierungen in der XZ-Ebene zugelassen. Die Bewegung in eine der anderen Richtungen wird nach wie vor unterbunden.

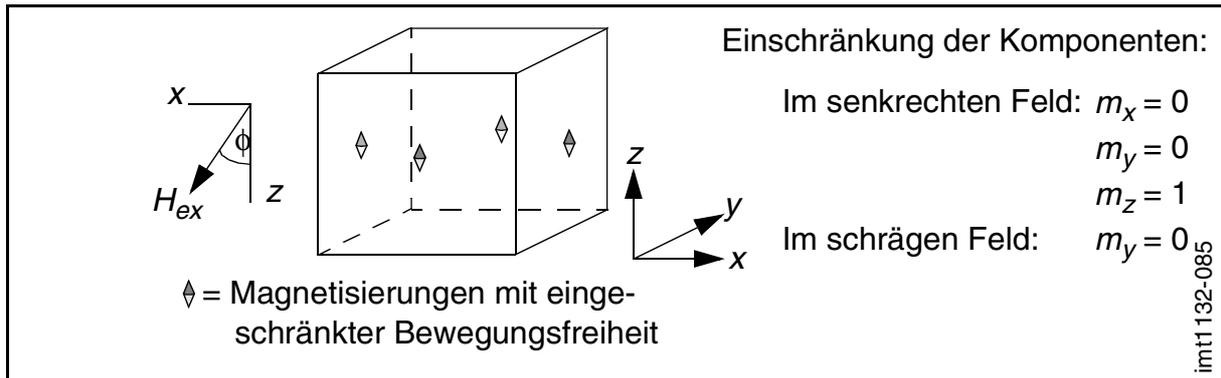


Bild 7.9: Einschränkungsbefingung für die homogene Rotation

Da die homogene Rotation ein allmählich eingeleiteter Schaltvorgang ist, läßt sich dieser anhand der Veränderung der Magnetisierung beschreiben. Hierzu wird die Suszeptibilität über das externe Feld aufgetragen. Da durch ein hohes Q die homogene Rotation bevorzugt wird, kann diese an dem Beispiel der Variante 1 verdeutlicht werden. Bild 7.10 zeigt die über das Volumen gemittelte Magnetisierung, aufgetragen über das externe Feld.

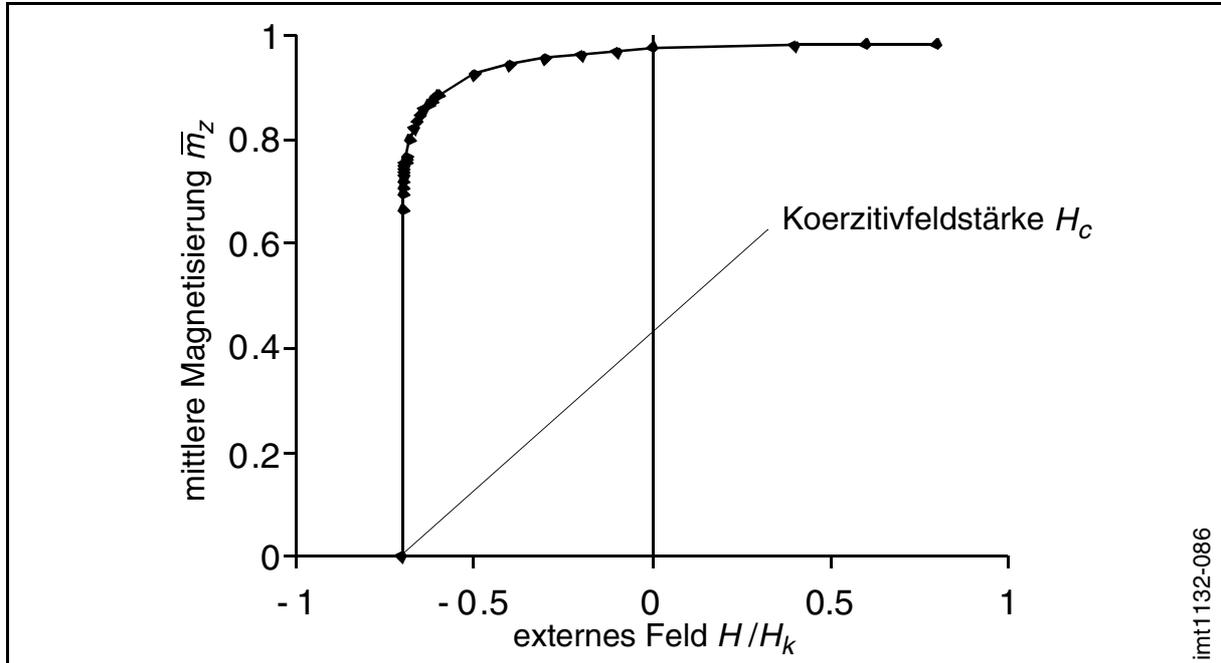


Bild 7.10: Mittlere Magnetisierung im Falle einer homogenen Rotation (Variante 1)

Man erkennt, daß die Magnetisierung kontinuierlich abnimmt, bis zu dem Punkt, wo das System schaltet. Der exakte Schalterpunkt läßt sich mittels der Suszeptibilitätsmethode einfach bestimmen. Hierzu wird die Suszeptibilität als $\chi = dm_z/dh$ verwendet.

Trägt man ihren Kehrwert, d.h. die inverse Suszeptibilität ($1/\chi = dh/dm_z$) auf, so erkennt man, daß die Kurve beim Schaltfeld den Wert Null erreicht (Bild 7.11). Trägt man nunmehr die quadrierte, inverse Suszeptibilität auf, so nimmt die Funktion die Gestalt einer Gerade an und der Schaltpunkt kann einfach durch Extrapolation bestimmt werden. Bei dem gezeigten Beispiel führt dies zu einem Schaltpunkt von $-0,702 H_k$.

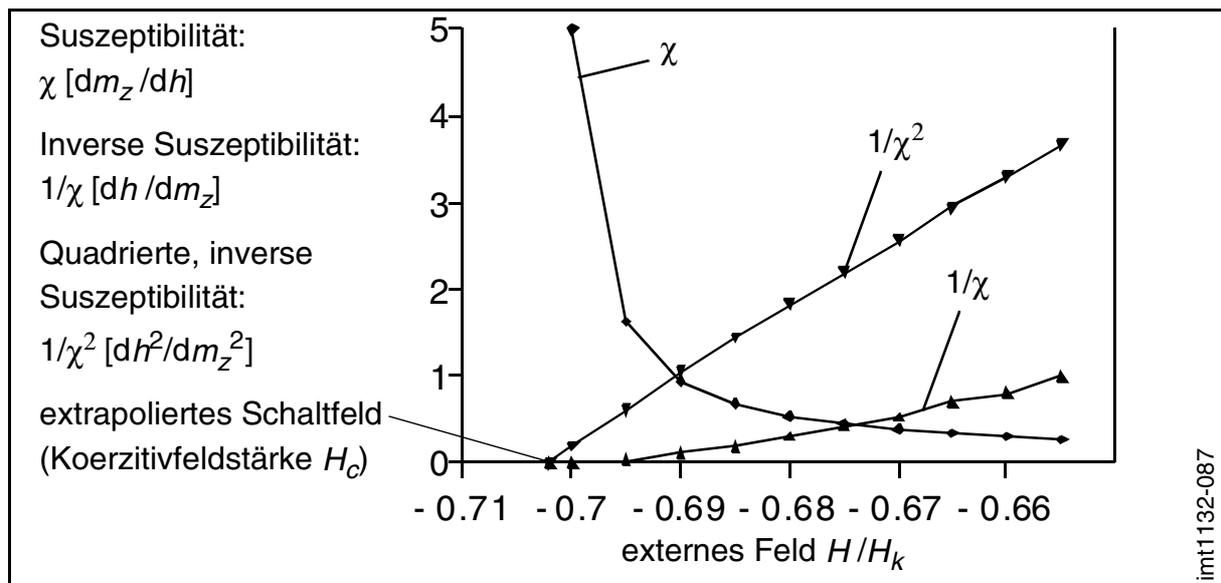


Bild 7.11: Suszeptibilität, inverse und quadrierte inverse Suszeptibilität für den Fall einer homogenen Rotation (Variante 1)

Bei dieser Vorgehensweise stellt sich die Frage, an welchem Ort der Schaltvorgang eingeleitet wird. Eine Darstellung der Suszeptibilität jeder Magnetisierung zeigt die sogenannten „Keime“ des Schaltens. Bild 7.12 zeigt die Suszeptibilität der oberen Oberfläche des Würfels.

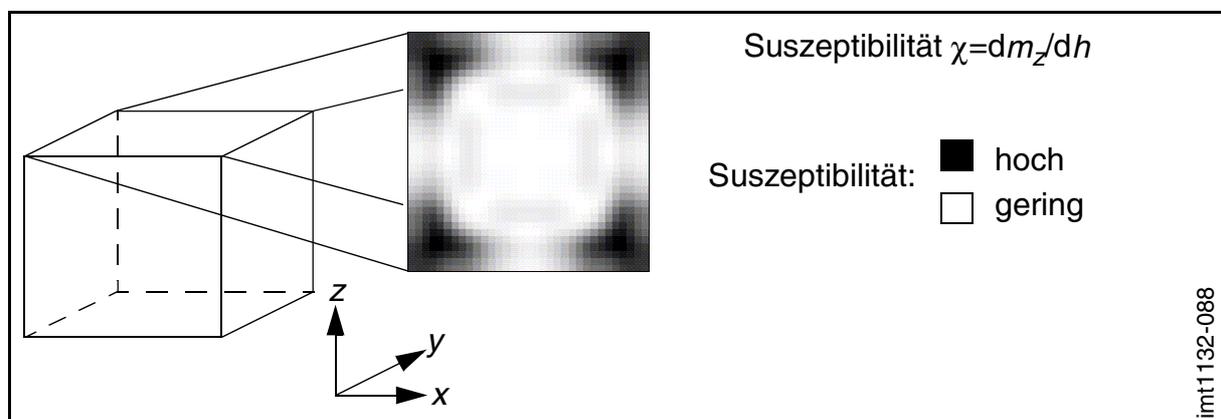


Bild 7.12: Suszeptibilität an der Oberfläche des Würfels

Man erkennt, daß die Suszeptibilität an den Ecken hoch ist, d.h., daß dort der Schaltvorgang beginnt, also sich auch dort die Keime des Schaltens befinden. Durch diese Darstellung kann gezeigt werden, daß die homogene Rotation durch ein verstärktes Aufspreizen der Magnetisierungen an den Oberflächen eingeleitet wird und die Magnetisierungen nicht über eine Kante hinweg brechen.

7.3.2 Kontinuierliche Verdrillung

Die kontinuierliche Verdrillung beschreibt einen Schaltprozeß, bei dem der gesättigte Spreizzustand einen Zustand von Verdrillung, also einen Wirbel, durchläuft. Die Besonderheit dieses Vorganges ist, daß die Magnetisierung gleichmäßig abnimmt. Bild 7.13 zeigt die Magnetisierung in Abhängigkeit des externen Feldes für die Variante 3.

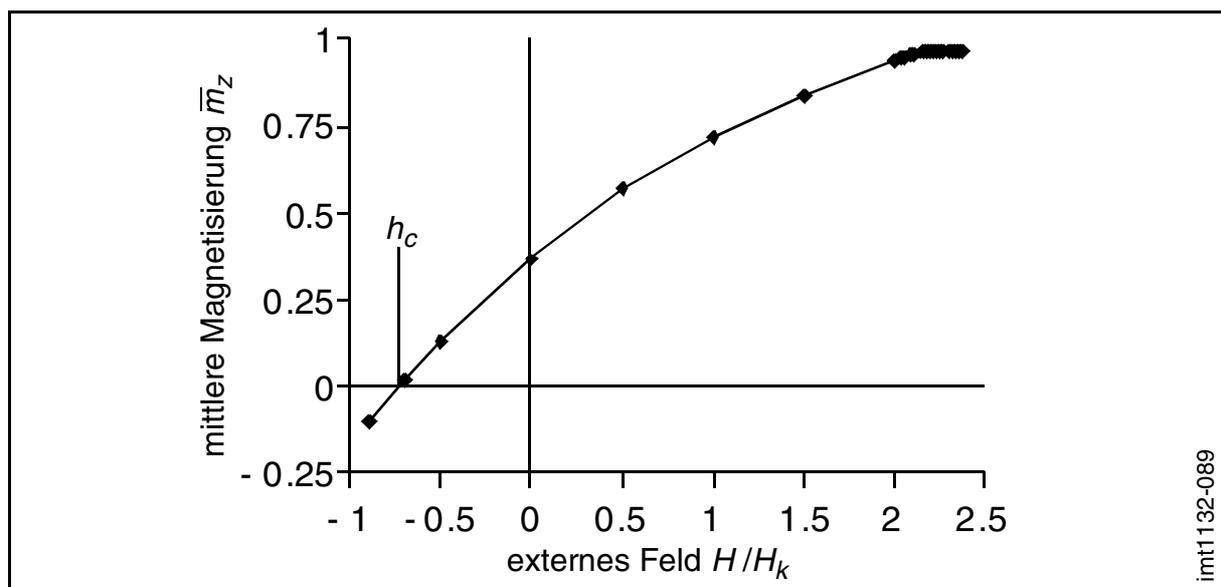
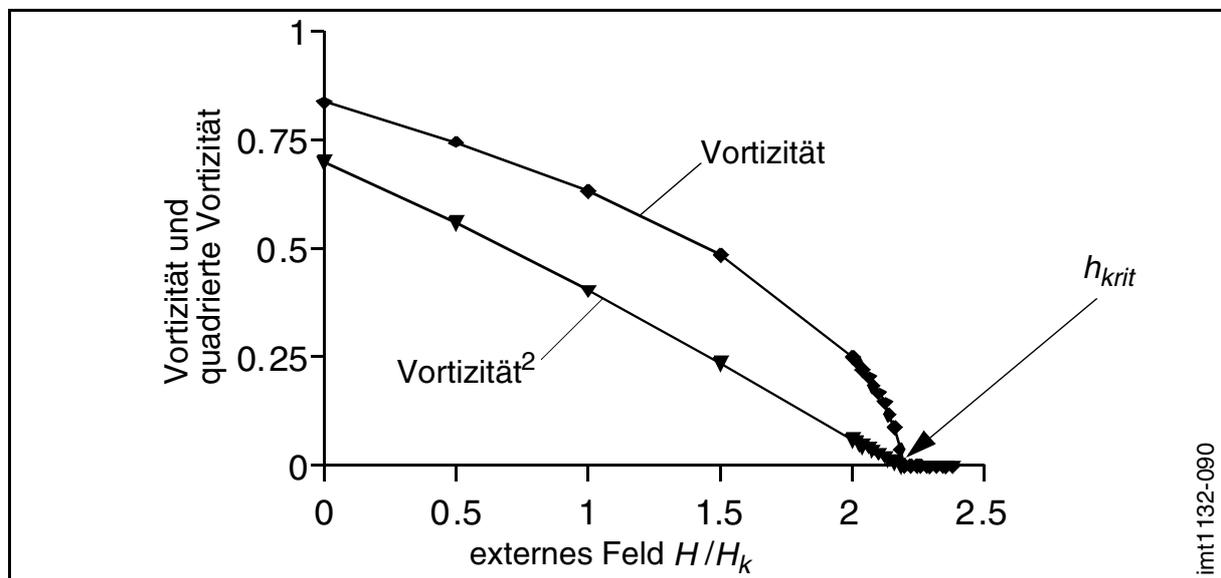


Bild 7.13: Magnetisierung und Vortizität bei dem Beispiel einer kontinuierlichen Verdrillung (Variante 3)

Bei diesem Schaltvorgang sind keine Einschränkungsbedingungen erforderlich, da der Vorgang sehr früh und eindeutig eingeleitet wird, so daß während der Simulation nicht die Gefahr besteht, daß eine Konfiguration unrealistisch gewechselt wird. Die Koerzitivität des Systems läßt sich leicht feststellen. Sie liegt an dem Punkt, wo die mittlere Magnetisierung zu Null wird. Wichtig bei diesem Vorgang ist, zu untersuchen, bei welchem Feld die kontinuierliche Verdrillung einleitet wird. Dieses Feld wird als kritisches Feld h_{krit} bezeichnet. Hierzu wird die sogenannte Vortizität betrachtet. Diese

stellt das Umlaufintegral entlang der XY-Oberflächenkanten des Würfels dar. Besitzt die Vortizität den Wert Eins, so bedeutet dies, daß die Magnetisierungen ausschließlich in einem Verdrillungszustand vorliegen und keine senkrechte Komponente existiert. Wird die Vortizität hingegen Null, dann liegt keine Verdrillung vor. Die Konfiguration befindet sich somit im Spreizzustand. Man erkennt, daß die Vortizität bei einem ausgezeichneten Feld zu steigen beginnt. Dies ist das kritische Feld, bei welchem der Schaltvorgang eingeleitet wird. Um diesen Punkt zu bestimmen, kann die quadrierte Vortizität verwendet werden. Diese erweist sich als eine Gerade und ermöglicht leicht die Interpolation des kritischen Feldes. Bei [Bild 7.14](#) liegt dieses kritische Feld bei $2,19 H_k$.



[Bild 7.14](#): Vortizität bei einer kontinuierlichen Verdrillung (Variante 3)

7.3.3 Katastrophale Verdrillung

Die Besonderheit der katastrophalen Verdrillung wird deutlich, wenn man die gemittelte Magnetisierung der Variante 2 in [Bild 7.15](#) betrachtet. Der Punkt des Schaltens tritt unvorhergesehen auf, d.h. er läßt sich nicht anhand des Verlaufs der Suszeptibilität erkennen. Der Grund hierfür wurde bereits in Kapitel 2.5 am Beispiel des *Stoner-Wohlfarth* Modells erläutert. Er liegt in der Symmetrie des Verlaufs der Energien (vgl. [Bild 2.23](#)). Diese Symmetrie existiert bei der „kontinuierlichen Verdrillung“ nicht. Hier ist es nun besonders schwer zu verhindern, daß numerisches Rauschen einen ungenauen Schaltpunkt vorhersagt. Um diese Ungenauigkeit zu verhindern, bedarf es einer

streng systematischen Vorgehensweise. Hierzu werden Einschränkungsbedingungen wie in [Bild 7.16](#) definiert. Die Magnetisierung wird an den Kantenmitten der oberen und unteren Oberfläche des Würfels festgehalten. Der Winkel, den die eingeschränkten Magnetisierungen mit den Flächenkoordinaten der benachbarten Seitenfläche einnehmen, kann variiert werden und wird η genannt. Falls η gleich Null ist, wird eine Verdrillung verhindert. Wird für η ein positiver Wert verwendet, so wird eine Verdrillung induziert.

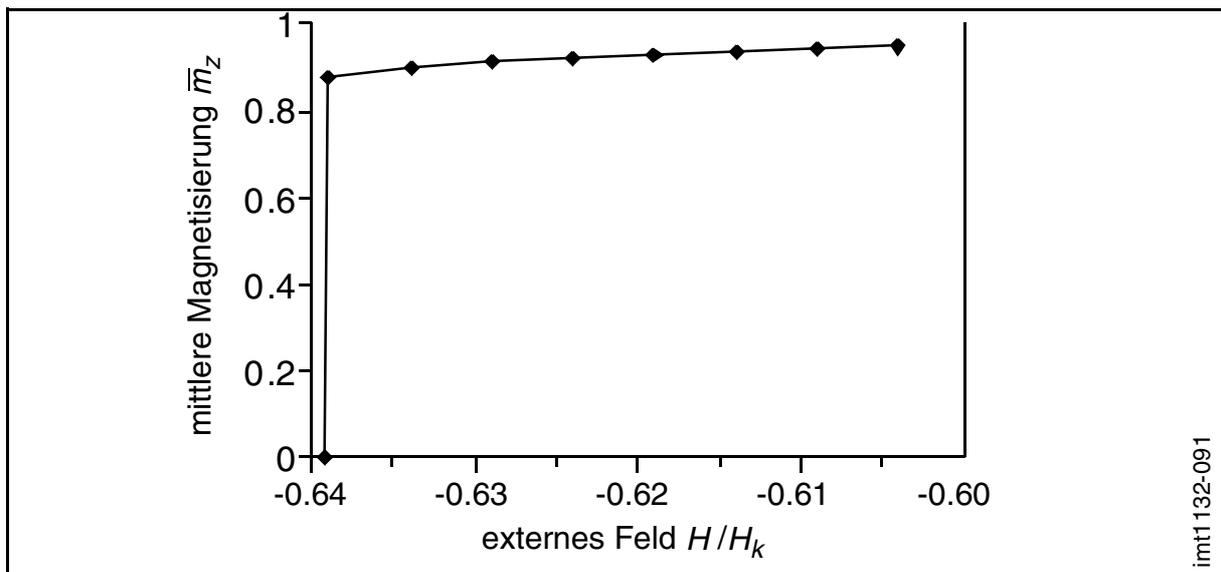


Bild 7.15: Verlauf der gemittelten Magnetisierung bei einer katastrophalen Verdrillung (Variante 2)

Betrachtet man bei einem Induzieren einer Verdrillung den Verlauf der Energie, so kann man Aussagen darüber treffen, ob diese Verdrillung ein gewünschter oder ein durch die Einschränkungsbedingung erzwungener Zustand ist. In dem Fall, daß die Energie sinkt, stellt der verdrillte Zustand eine vom System bevorzugte Konfiguration dar und der Schaltvorgang der katastrophalen Verdrillung ist eingetreten. Steigt die Energie bei Induzieren einer Verdrillung an, so befindet sich das System noch oberhalb des Schaltpunktes.

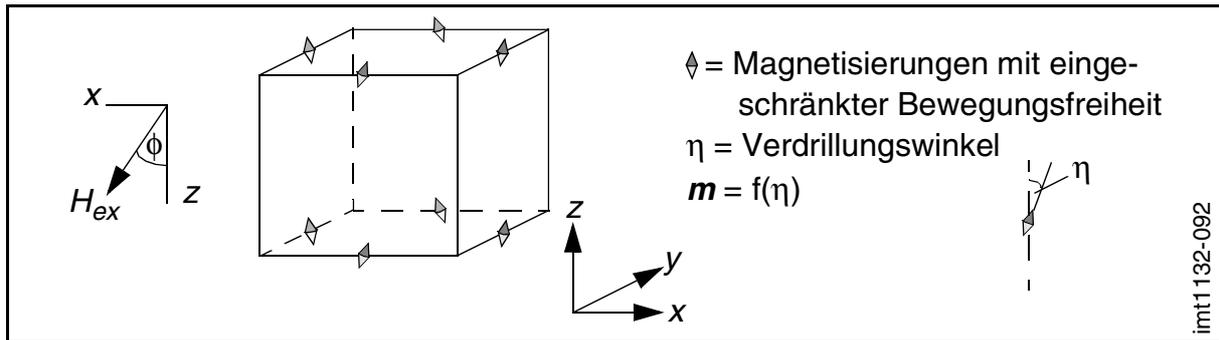


Bild 7.16: Einschränkungsbefingung für die Verdrillung

Um den Vorgang zu verdeutlichen, werden die Magnetisierungen beobachtet (**Bild 7.17**). Bei einem externen Feld, welches größer als das Schaltfeldes ist, wird durch den Verdrillungswinkel eine Verdrillung induziert. Allerdings folgen die Magnetisierungen nur sehr schwach der Vorgabe des Verdrillungswinkels. Dies liegt daran, daß durch diesen Vorgang die Energie ansteigt. Das System ist somit noch nicht bereit den Schaltvorgang einzuleiten.

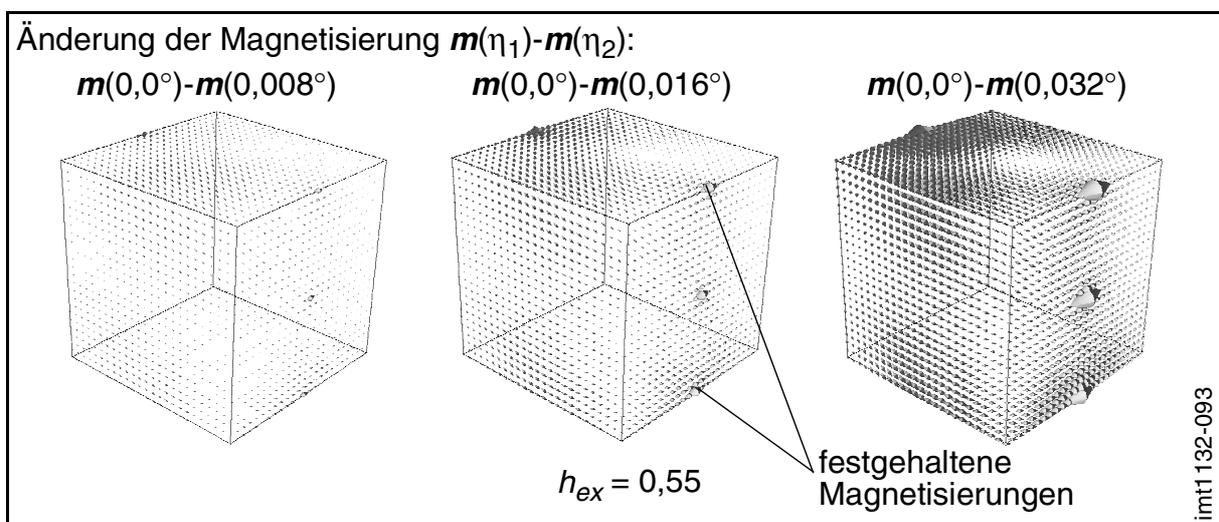


Bild 7.17: Magnetisierung für ein Feld oberhalb des Schaltfeldes ($h_{ex} = 0,55$)

Bei einem anliegenden Feld unterhalb des Schaltfeldes (**Bild 7.18**) führt die induzierte Verdrillung dazu, daß sich die Magnetisierungen selbständig in Richtung einer Wirbelstruktur bewegen. Eine Reaktion des Systems ist daran zu erkennen, daß die Wirkung der Induktion stärker ist als die Vorgabe durch den Verdrillungswinkel.

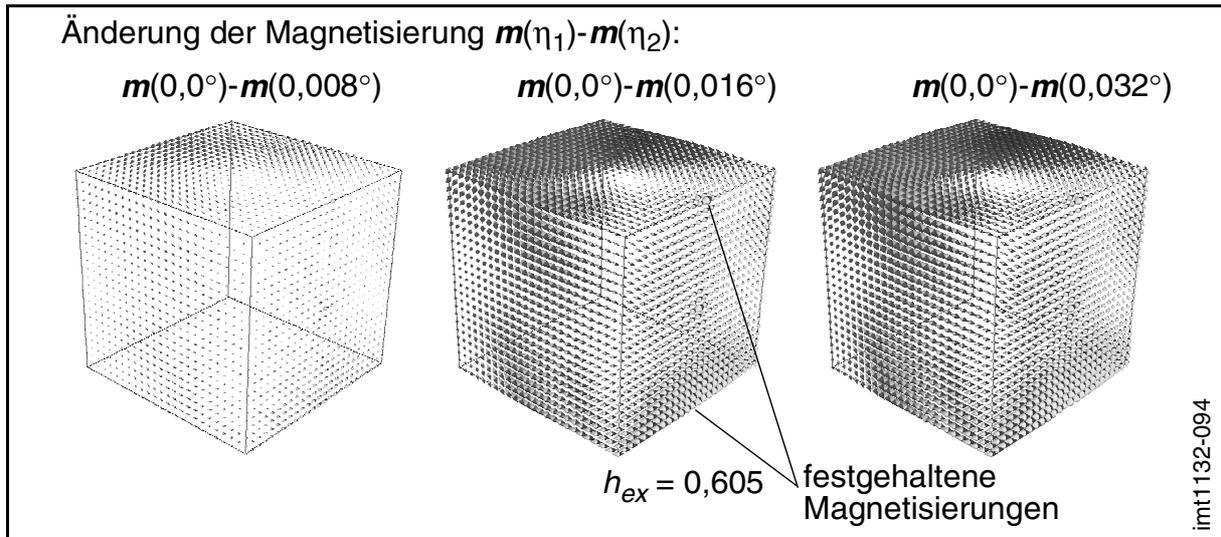


Bild 7.18: Magnetisierung für ein Feld unterhalb des Schaltfeldes ($h_{ex} = 0,605$)

Es wird erkennbar, daß nicht nur eine Unterscheidung zwischen einem Anstieg der Energie und einem Abfall der Energie getroffen werden kann. Vielmehr weisen die Krümmungen der Energiekurven ein klares Verhalten auf, wie es in [Bild 7.19](#) erkennbar ist.

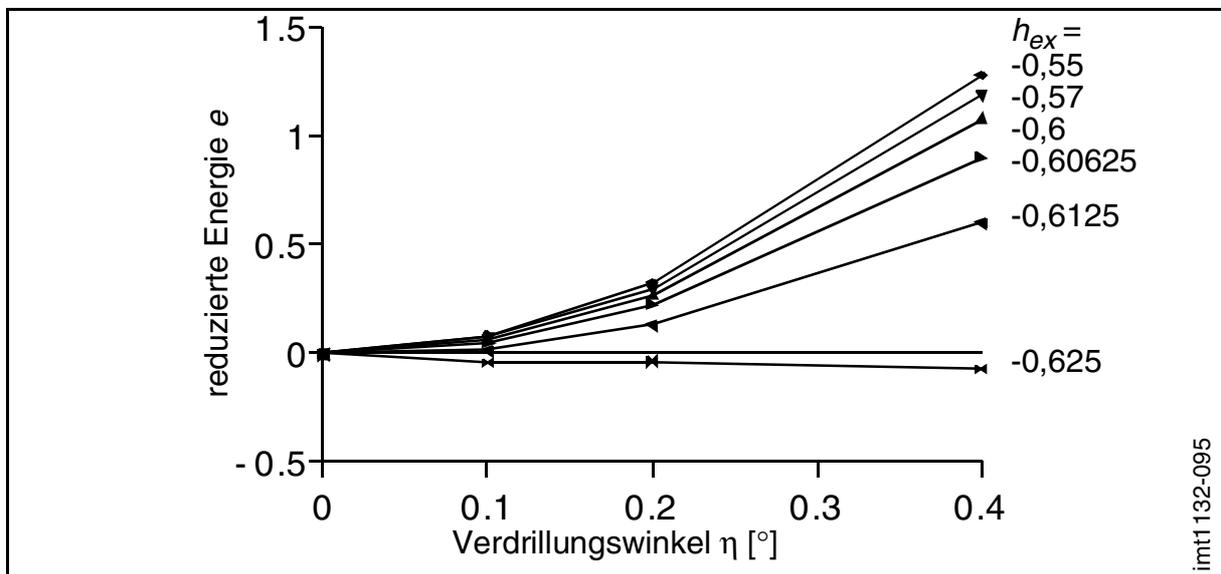


Bild 7.19: Verlauf der Energie in Abhängigkeit des Verdrillungswinkels (Variante 2)

Hier ist die Krümmung der Energieverläufe in Abhängigkeit des externen Feldes dargestellt. Die positive Krümmung, welche bedeutet, daß das System noch nicht schaltet, nimmt gleichmäßig ab (Bild 7.20). Dies geschieht bis zu dem Punkt, wo sie negativ wird. In diesem Fall ist der Schaltfeld erreicht. Dort, wo die Kurve die X-Achse schneidet, läßt sich das exakte Schaltfeld durch Interpolation bestimmen.

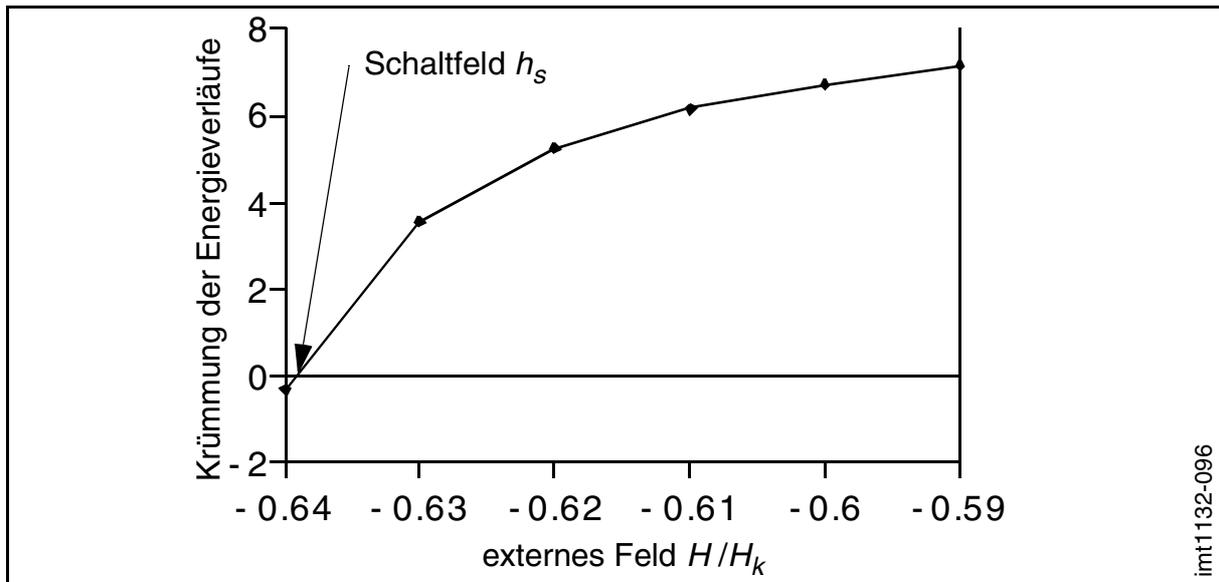


Bild 7.20: Verlauf der Krümmung des Energieverlaufs aus Bild 7.19 (Variante 2)

Mit dieser Methode läßt sich nun auch der Schaltfeld bei der katastrophalen Verdrillung berechnen. Für das Beispiel der Variante 2 ergibt sich der Schaltfeld zu $-0,6383 H_k$.

7.3.4 Schwach kontinuierliche Verdrillung

In Grenzbereichen zwischen der eindeutig „kontinuierlichen“ und der „katastrophalen“ Verdrillung muß mit einem veränderten Verfahren gearbeitet werden. Um diesen Zustand zu zeigen, wird die Variante 2 leicht modifiziert und Q auf 0,4 reduziert. Die Vorgehensweise zur Charakterisierung des Schaltvorganges ähnelt dem des katastrophalen Schaltens. Es wird ebenfalls ein Verdrillungswinkel definiert, welcher verändert werden kann. Gleichzeitig wird der Verlauf der Energie beobachtet. Wählt man sehr kleine Verdrillungswinkel, so kann man erkennen, daß kurz oberhalb des Schaltfeldes die Energie leicht absinkt, bevor sie wieder steigt. Dies bedeutet, daß die Symmetrie bereits vorher gebrochen wurde und das System bis zu dem Schaltfeld kontinuierlich schaltet. Allerdings ist der Bereich zwischen der Symmetriebrechung

und dem Schaltpunkt klein. Um nun den Punkt der Symmetriebrechung und des Schaltens exakt zu bestimmen, muß der Tiefpunkt der Energieverläufe berechnet werden. Hierfür wird die Methode der kleinsten Fehlerquadrate auf ein Polynom dritten Grades angewendet. Sind die Koeffizienten des Polynoms bekannt, so kann leicht mittels der ersten Ableitung der Tiefpunkt bestimmt werden. Trägt man diesen über das Feld auf, so erhält man einen charakteristischen Verlauf, wie in Bild 7.21 dargestellt. Ausgehend von einem hohen Feld, wird dort die Symmetrie gebrochen, wo der Wert des Tiefpunktes positiv wird. Bei weiterer Reduktion des Feldes steigt die Kurve an. Nähert sich das Feld dem Schaltfeld, so läuft die Kurve ins Unendliche. Dies bedeutet, daß das System instabil wird und sich ein anderes lokales Minimum einstellt. Der Schaltpunkt ist somit erreicht. Da der Verlauf ins Unendliche nur schwer eine Extrapolation des Schaltfeldes zuläßt, kann die Suszeptibilitätsmethode angewendet werden. Die Suszeptibilität, definiert als $\chi = dm_z/dh$, wird in ihrer Inversen über das Feld aufgetragen. Das Ergebnis ist annähernd eine Gerade (Bild 7.21). Die Extrapolation auf den Schaltpunkt ist nun leicht möglich. Bei dem gegebenen Beispiel beträgt somit das Schaltfeld $-0,675 H_k$ und der Punkt der Symmetriebrechung liegt bei $-0,59 H_k$.

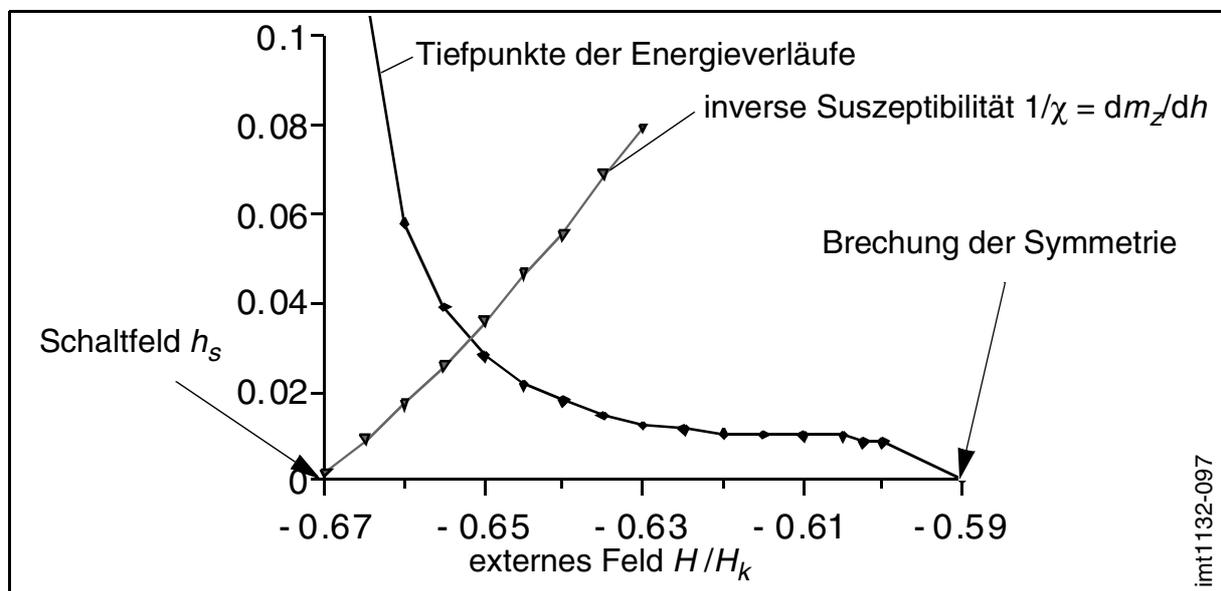


Bild 7.21: Tiefpunkt des Polynom dritten Grades zur Beschreibung des vom Verdrehungswinkel abhängigen Energieverlaufs, sowie die inverse Suszeptibilität der mittleren Magnetisierung

7.4 Schaltvorgänge im schrägen Feld

Schaltvorgänge im schrägen Feld unterscheiden sich von den Schaltvorgängen im senkrechten Feld hauptsächlich durch die Anwendung anderer Einschränkungsbewingungen. Da die Magnetisierungen die Möglichkeit besitzen, müssen in Richtung des Feldes zu kippen, ist es nicht mehr zulässig, die gezeigten eingeschränkten Vektoren in jeder Richtung festzulegen. In Bild [Bild 7.9](#) sind daher die Einschränkungsbewingungen für beide Richtungen des Feldes gezeigt. Im folgenden werden, für die in Kapitel 7.3 bereits vorgestellten Varianten, die Schaltvorgänge im schrägen Feld untersucht und dargestellt. Durch die ausschließliche Einschränkung der Y-Komponente der Magnetisierung wird eine Rotation der Magnetisierung in der XZ-Ebene zugelassen. Sie kann somit dem Feld folgen.

7.4.1 Kontinuierliche Verdrillung

In Kapitel 7.3.2 konnte gezeigt werden, daß bei Variante 3 eine kontinuierliche Verdrillung dominiert. Von Bedeutung ist, ob bei schrägem Feld ebenfalls eine kontinuierliche Verdrillung der bevorzugte Schaltvorgang ist. Hierzu muß abhängig vom Winkel ϕ (Winkel zwischen dem externen Feld und der uniaxialen Achse) das Schaltfeld bestimmt werden. Die Anwendung der Methoden zu Berechnung des Schaltfeldes für die „kontinuierliche Verdrillung“ und die der „homogenen Rotation“ sind beide notwendig, um dann durch den Vergleich der Lösungen den bevorzugten Schaltvorgang zu erhalten.

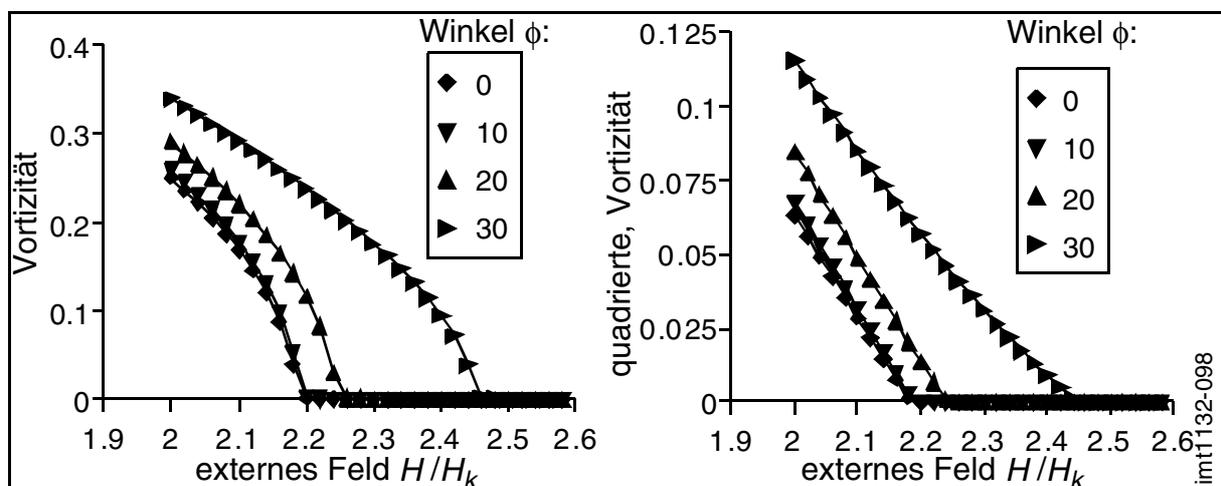


Bild 7.22: Vortizität und quadrierte Vortizität für verschiedene Winkel ϕ , abhängig vom externen Feld (Variante 3)

Bild 7.22 zeigt den Verlauf der Vortizität und der quadrierten Vortizität. Für alle Winkel ϕ ist die Charakteristik gleich und läßt eine Interpolation des Schaltfeldes zu. Trägt man die interpolierten Schaltfelder auf, so kann man das in Bild 7.23 dargestellte Verhalten in Abhängigkeit des Winkels ϕ erkennen. Es läßt sich zeigen, daß das Schaltfeld bei Erhöhung des Winkels ϕ zunimmt. Dies bedeutet, daß ein schräges Feld dazu führt, daß der Schaltvorgang früher eingeleitet wird. Bei weiterer Erhöhung des Winkels ϕ , nimmt dann das Schaltfeld wieder leicht ab. Die Untersuchungen wurden bis zu einem Winkel ϕ von 90° durchgeführt.

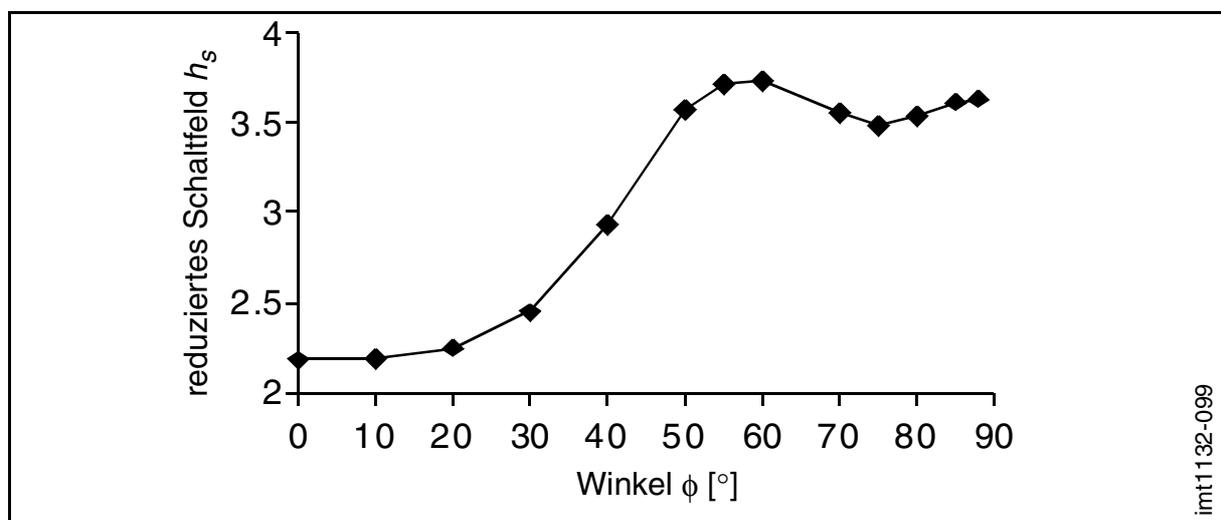


Bild 7.23: Schaltfeld bei „kontinuierlicher Verdrillung“ in Abhängigkeit des Winkels ϕ (Variante 3)

Um zu überprüfen, ob eine „homogene Rotation“ auftritt, ist es notwendig, die Rechnungen für ein schräges Feld durchzuführen. Bild 7.24 zeigt die inverse quadrierte Suszeptibilität für drei verschiedene Winkel ϕ . Unterhalb von 30° läßt sich die *homogene Rotation* nicht anwenden. Der Drang des Systems in eine kontinuierliche Verdrillung ist zu hoch und verzerrt das Ergebnis zu stark. Oberhalb von 30° jedoch können für die homogene Rotation Verläufe errechnet werden. Allerdings ist zu erkennen, daß die quadrierte inverse Suszeptibilität nicht den typischen Verlauf (Bild 7.11) aufweist. Es ist aber dennoch möglich zu bestimmen, wann die quadrierte inverse Suszeptibilität zu Null wird.

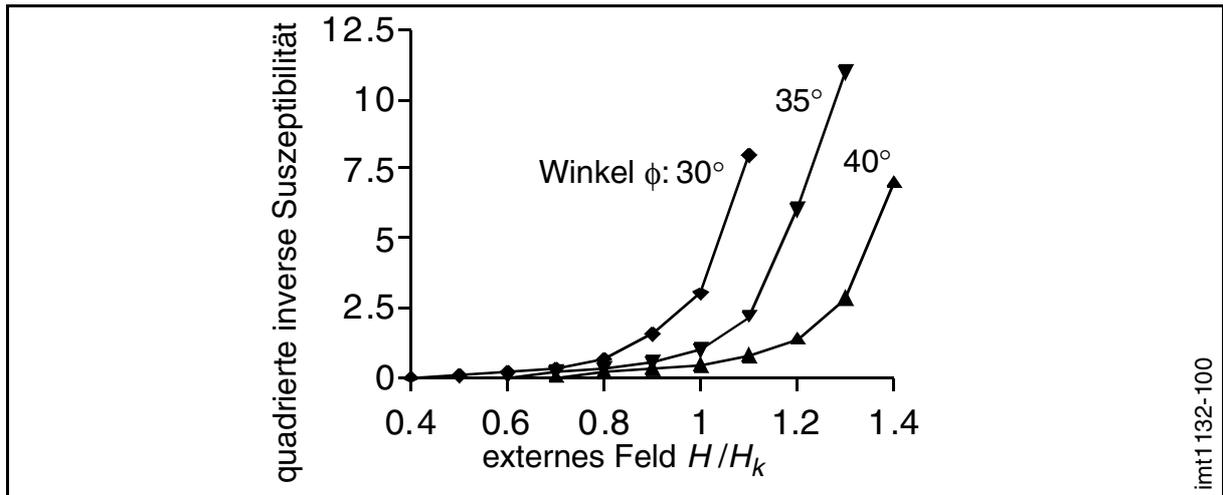


Bild 7.24: Inverse Suszeptibilität in Abhängigkeit des externen Feldes (Variante 3)

Trägt man nun das extrapolierte Schaltfeld in Abhängigkeit des Winkels ϕ auf, so erhält man den in [Bild 7.25](#) dargestellten Verlauf. Vergleicht man die Schaltfelder mit den Schaltfeldern einer kontinuierlichen Verdrillung ([Bild 7.23](#)), so wird deutlich, daß die kontinuierliche Verdrillung für jeden Winkel ϕ bei einem höheren Feld auftritt. Es kann somit eindeutig gezeigt werden, daß bei der Variante 3 trotz eines schrägen Feldes die kontinuierliche Verdrillung nicht von einer homogenen Rotation abgelöst wird.

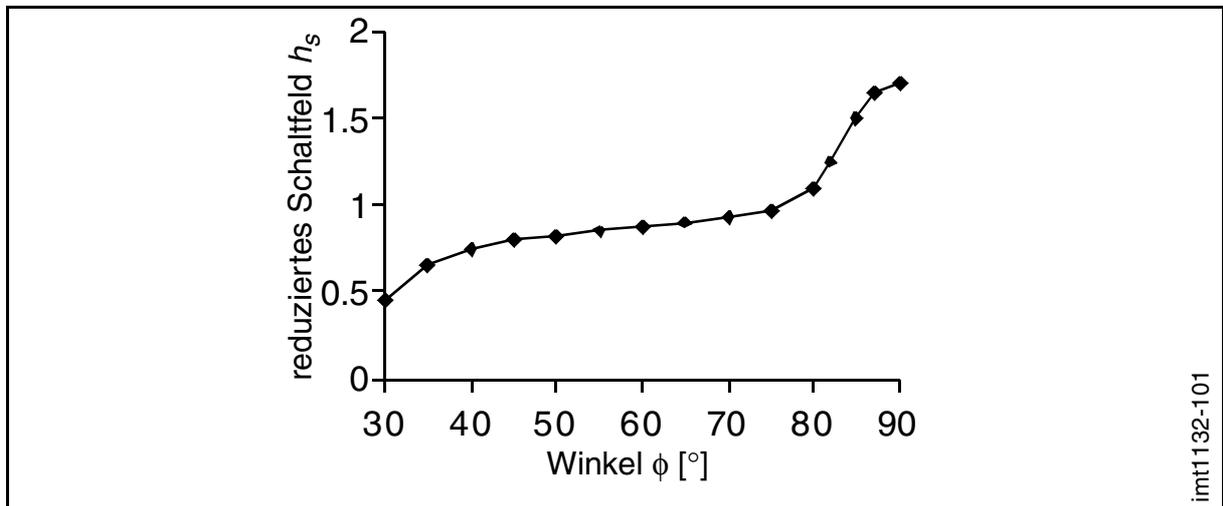


Bild 7.25: Interpoliertes Schaltfeld bei der homogenen Rotation

7.4.2 Schwache, kontinuierliche Verdrillung

Bei der modifizierten Variante 2 ($Q = 0,4$) zeigte bereits die Bestimmung des Schaltfeldes aus Kapitel 7.3.4, daß nicht eine rein katastrophale Verdrillung auftritt, sondern eine leichte kontinuierliche Verdrillung. Bei einem schrägen Feld läßt sich nun vermuten, daß aufgrund der zusätzlichen Brechung der Symmetrie der Schaltvorgang zunehmend kontinuierlich wird. Um dies zu überprüfen, kann die Vorgehensweise aus Kapitel 7.3.4 verwendet werden. Bild 7.26 zeigt das Ergebnis der Bestimmung des Tiefpunktes des Verlaufs des Verdrillungswinkels.

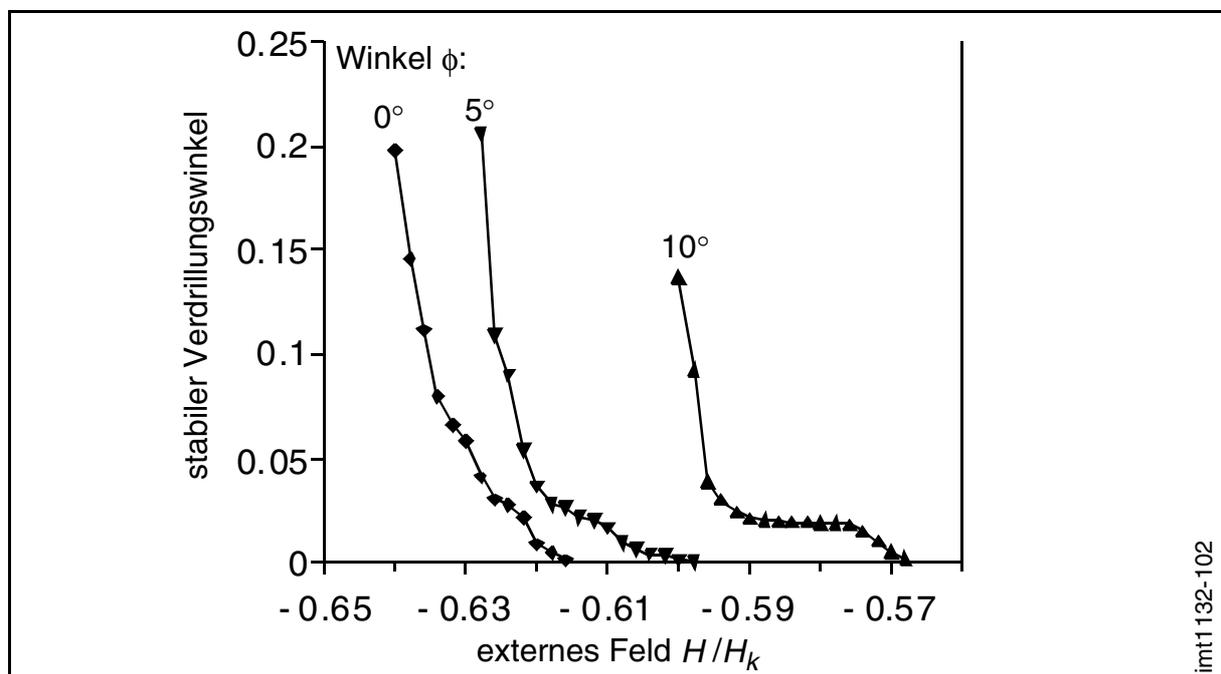


Bild 7.26: Verlauf des stabilen Verdrillungswinkels in Abhängigkeit des Feldes, für verschiedene Winkel ϕ

Der charakteristische Verlauf, der bereits in Kapitel 7.3.4 beschrieben wurde, läßt sich auch bei einem schrägen Feld erkennen. Aus den Kurven kann durch Extra- und Interpolation das Schaltfeld bzw. das kritische Feld bestimmt werden. Bild 7.27 zeigt hierzu das Ergebnis. Für beide Felder ist deutlich zu erkennen, daß sie mit zunehmendem ϕ auch höhere Werte erzielen. Dies bedeutet, daß auch bei diesem Beispiel ein schräges Feld früher zum Schalten führt, als wenn das Feld parallel zur uniaxialen Achse liegt.

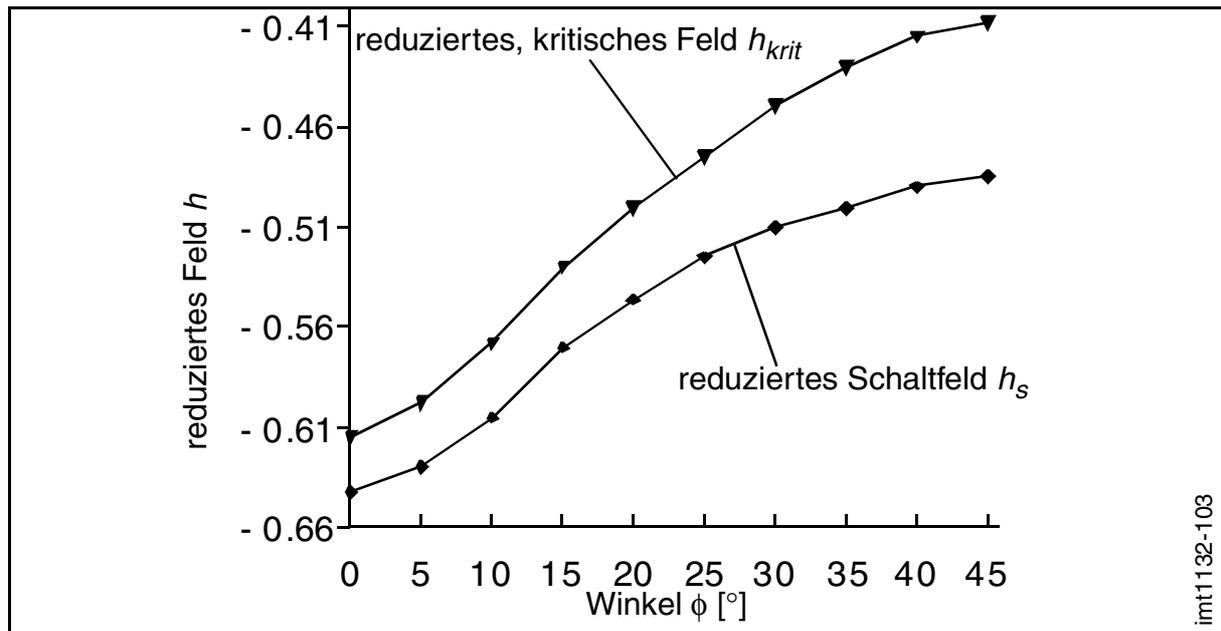


Bild 7.27: Schaltfeld und kritisches Feld in Abhängigkeit des Winkels ϕ

Betrachtet man die Differenz zwischen dem kritischen Feld und dem Schaltfeld (Bild 7.28), so wird durch den Anstieg deutlich, daß ein schräges Feld zu einer früheren Symmetriebrechung führt. Die Schrägstellung des Feldes bei der Variante 2 bedeutet, daß die ursprünglich schwach kontinuierliche Verdrillung bei $\phi = 0$ für positive ϕ in eine eindeutige kontinuierliche Verdrillung übergeht.

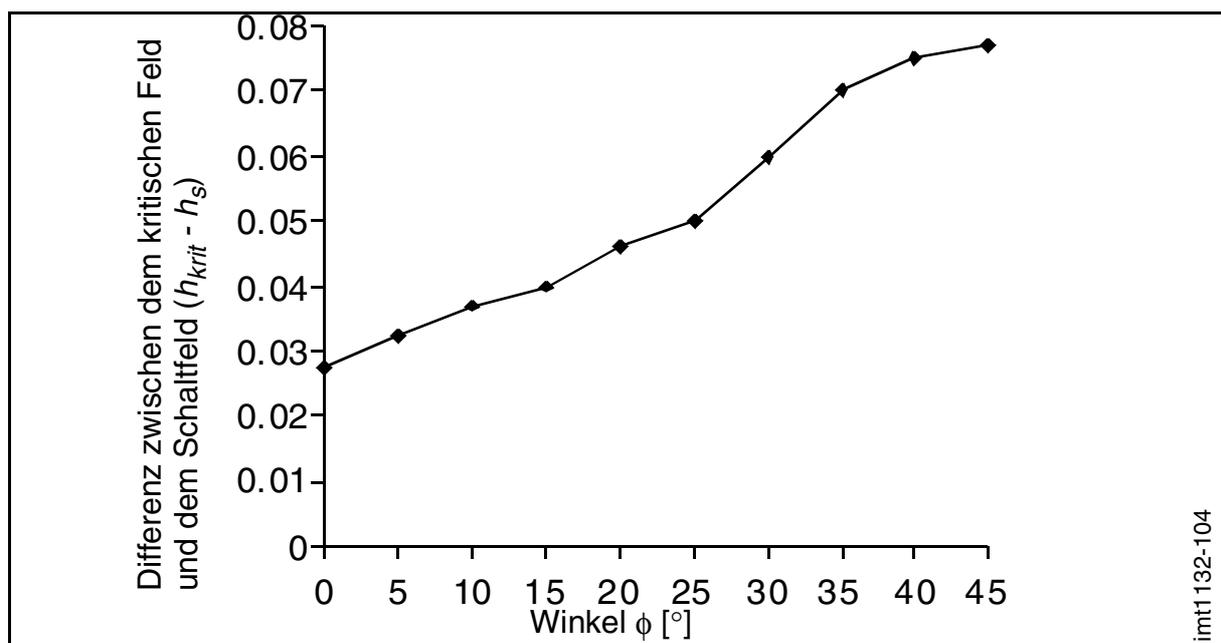


Bild 7.28: Differenz zwischen dem kritischen Feld h_{krit} und dem Schaltfeld h_s in Abhängigkeit des Winkels ϕ

8 Diskussion der Ergebnisse und Ausblick

8.1 Effizienzsteigernde Methoden

Die Mehrfachgittermethode dient der Effizienzsteigerung der Streufeldberechnung bei zweidimensionalen Simulationen. Sie ermöglicht die Anwendung der FFT auf mehrere gekoppelte Gitter mit unterschiedlicher Diskretisierung. Hierbei werden zwei Varianten vorgestellt, die sich darin unterscheiden, daß die Zweite einen zusätzlichen Schritt der Mittelung der Ladungsverteilung des feinen Gitters und deren Verwendung bei der Potentialberechnung des groben Gitters beinhaltet. Diese Vorgehensweise führt dazu, daß Variante 2 Vorteile gegenüber der ersten Variante besitzt. Diese sind, daß auch bei einer asymmetrischen Lage des feinen Gitters nur geringe Fehler auftreten. Die Methode weist insgesamt eine sehr hohe Effizienz auf. So erreicht sie Geschwindigkeitsvorteile von bis zu 300% und Speichereinsparungen in demselben Umfang. Allerdings stellt das Verfahren eine hohe Anforderung an den Benutzer, da die Lage der Gitter und die Diskretisierung an das Problem angepaßt werden müssen. Eine Automatisierung der Methode und eine Erweiterung auf drei Dimensionen ist denkbar, war aber nicht Inhalt dieser Arbeit. So konnte diese Methode auch für die Untersuchungen an den Mikrostrukturen nicht verwendet werden.

Die Methode der Parallelisierung der Streufeldberechnung dient der Reduzierung der Rechenzeiten bei dreidimensionalen Simulationen. Sie konnte erfolgreich bei den durchgeführten Berechnungen eingesetzt werden. Allerdings ist eine Mindestanzahl von Elementen erforderlich, bei denen die Anwendung der Parallelisierung sinnvoll ist. Diese liegt bei ca. 8000 Elementen. Bei dünnen Schichtstrukturen mit einem Verhältnis der Länge zur Breite von 2:1, kann dies beispielsweise eine Diskretisierung von $64 \times 32 \times 4$ Elementen bedeuten. Um eine ausreichende Genauigkeit der Ergebnisse zu erzielen, würde dies bei Strukturen aus Permalloy eine Größe von ca. $320 \text{ nm} \times 160 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$ zur Folge haben. Trotz der Reduzierung der Rechenzeiten durch eine Parallelisierung, können bei der mikromagnetischen Simulation die Modelle nicht beliebig vergrößert werden. Die obere Grenze liegt bei der verwendeten Hardware bei einem Speicherbedarf von 1 GB und auch die Rechenzeit sollte nicht mehr als ca. 5 Tage benötigen, um die Simulationen handhabbar zu halten. Betrachtet man das in dieser Arbeit größte Modell einer dünnen Schicht mit den Maßen $12 \mu\text{m} \times 6 \mu\text{m} \times 12 \text{ nm}$, so stößt dieses an die genannte obere Grenze.

8.2 Untersuchungen an dünnen Schichtstrukturen

Die bei der Simulation der dünnen Schichtstrukturen berechneten Nullfeldkonfigurationen zeigen die bereits experimentell bekannten Magnetisierungskonfigurationen. Ein entscheidender Vorteil der simulationstechnischen Untersuchungen ist, daß die genaue Energie der Konfiguration bestimmt werden kann und somit die unterschiedlichen metastabilen Zustände energetisch miteinander verglichen werden können. Die hohe Zahl der reell möglichen Lösungen und ihre zum Teil schwache Stabilität gewährleisten nicht, daß die numerische Simulation ohne künstliche Hilfestellung, wie z.B. Startfunktionen und Einschränkungsbedingungen, alle diese Konfigurationen finden kann. Für die praktische Anwendung wären größere Systeme sicherlich wünschenswert. Diese sind, durch den bereits erwähnten begrenzten Speicher- und Rechenzeitbedarf, zu dieser Zeit mikromagnetischen Simulationen nicht zugänglich.

8.3 Untersuchungen an kleinen Würfelementen

Die Untersuchungen der Schaltvorgänge kleiner Würfelemente zeigt, daß das Stoner-Wohlfarth Modell auch bei diesen Systemen mit vielen Freiheitsgraden teilweise seine Gültigkeit behält. So finden sich die charakteristischen Schaltvorgänge wieder und es lassen sich, wie beispielsweise bei der Suszeptibilitätsmethode, mit denselben Methoden die Schaltfelder bestimmen. Die durch die gezielte Wahl der Material- und Geometrieparameter auftretenden, verschiedenen Schaltvorgänge weisen unterschiedliche Koerzitivitäten auf. Zudem zeigt sich, daß die Neigung des erregenden, externen Feldes zu einem veränderten Schaltverhalten mit variierenden Schaltfeldern führen kann. Diese Ergebnisse sind für die gezielte Nutzung der Schalteigenschaften der kleinen Teilchen in praktischen Anwendungen wichtig.

8.4 Einschränkung der Aussagefähigkeit

Eine bei Simulationen oft gestellte Frage ist die nach der Genauigkeit der Ergebnisse. Vergleicht man die in Kapitel 6 dargestellten Grundkonfigurationen mit den in Kapitel 2 gezeigten realen Kerreffektaufnahmen, erkennt man, daß die Simulationsergebnisse optisch den wirklichen Messungen entsprechen. Die Problematik der mikromagnetischen Meßtechnik ist, die feinen Domänen aufzulösen. Insbesondere die Existenz eines externen Feldes erschwert die meßtechnische Analyse. Zudem lassen sich nur Aussagen über die Magnetisierungsanordnung an den Oberflächen treffen.

Die Erfassung der mittleren Magnetisierung in Abhängigkeit der Erregung mit einem externen Feld ist nur bedingt möglich. Hieraus wird deutlich, daß die Möglichkeiten zur Validierung der Simulationen mit Methoden geschieht, die selbst relativ unsicher sind. Es ist somit schwierig, eine wirkliche Validierung mit Meßergebnissen durchzuführen. Andererseits zeigt dies auch die Notwendigkeit der Simulationen. Weitere Einschränkungen der Simulationsergebnisse lassen sich finden: Die Theorie des Mikromagnetismus basiert auf der Annahme, daß ein eindeutiges kristallines Gitter existiert, dessen Ausrichtung fest definiert ist. In wirklichen Systemen kann nicht mit Sicherheit von einem solchen Zustand ausgegangen werden. Sowohl Gitterfehlstellen, als auch eine nicht eindeutige kristalline Anisotropie, verzerren die Ergebnisse. Es ist bekannt, daß gerade Gitterfehlstellen dazu führen können, daß Strukturen, die unter Umständen im theoretischen Sinne energetisch gesehen instabil sind, festgehalten werden. Eine Simulation mit den in dieser Arbeit verwendeten Methoden kann diese nicht berechnen. Es muß somit immer von einem Idealzustand ausgegangen werden. Weiterhin handelt es sich bei der numerisch gelösten Differentialgleichung um eine statische Variante der mikromagnetischen Theorie. Diese vernachlässigt den gyromagnetischen Effekt. In Fällen, in denen die Systeme einer sehr hochfrequenten Erregung im GHz Bereich ausgesetzt sind, spielen oftmals die Schaltgeschwindigkeiten eine große Rolle. Diese können mit der in dieser Arbeit verwendeten Technik nicht berechnet werden. Eine Simulation unter Verwendung der dynamischen Anteile ist möglich, erhöht aber den bislang schon sehr hohen Rechenzeitbedarf nochmals um ein Vielfaches. Dynamisch berechnete Systeme müssen aus diesem Grund deutlich kleiner sein, als die durch statische Simulation möglichen Modelle. Das für den Schaltvorgang entscheidende Schaltfeld läßt sich aber durch statische Berechnungen ausreichend untersuchen. Erst der Zustand, welcher sich nach dem Schalten einstellt und die Schaltgeschwindigkeit, sind nur durch dynamische Rechnungen zu beschreiben.

8.5 Ausblick

In der Praxis werden Mikrosysteme, die mikromagnetische Effekte ausnutzen, schon lange eingesetzt. Die numerische, mikromagnetische Simulationstechnik ist ein nützliches Werkzeug, um die Vorgänge auch in den Bereichen, in denen die Meßtechnik nur bedingt Einblicke liefern kann, zu beschreiben. Mit der Weiterentwick-

lung meßtechnischer Verfahren zur Visualisierung und quantitativen Bestimmung von Magnetisierungsverteilungen wird in Zukunft die Möglichkeit gegeben werden, die mikromagnetische Simulationstechnik zu validieren. Dieses Zusammenführen der theoretischen und meßtechnischen Mikromagnetik ist entscheidend für die Entwicklung von Mikrosystemen. Da weitere Fortschritte in der Leistungsfähigkeit der Rechner, aber auch in der Effizienz numerischer Methoden zu erwarten sind, werden die dargestellten Methoden der mikromagnetischen Simulationstechnik auch für größere Systeme anwendbar sein. Der Fortschritt im Bereich der Hardware und Software sowie in der methodischen Vorgehensweise, aber auch der in der Numerik, ist besonders rasant. Eine Ausweitung solcher Simulationen auf größere Modelle ist somit absehbar.

9 Zusammenfassung

Die mikromagnetische Simulationstechnik erlaubt eine Analyse der magnetischen Eigenschaften von Systemen im Mikrometer- bis unteren Nanometerbereich. Die Simulationen sind bezüglich des Rechenzeit- und Speicherbedarfs sehr intensiv. Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Mehrfachgittermethode für zweidimensionale und die Methode der Parallelisierung für dreidimensionale Simulationen zeigen, daß die Effizienz der Streufeldberechnung gesteigert werden kann. Sie verwenden hierzu ein vorhandenes Programm als Grundlage und setzen die entsprechenden Methoden um. Die Mehrfachgittermethode ermöglicht die Anwendung der FFT auf mehrere gekoppelte Gitter mit unterschiedlicher Diskretisierung. Sie reduziert dadurch die Gesamtzahl der notwendigen Elemente und in diesem Zusammenhang die Rechenzeit und erhöht gleichzeitig die Genauigkeit der Ergebnisse. Zwei verschiedene Varianten werden vorgestellt, wobei sich die Zweite als besonders effektiv erweist, da sie bei einer asymmetrischen Lage des feinen Gitters mögliche Fehler vermeidet. Dies kann die erste Variante nicht. Eine Verifikation erfolgt mittels einer künstlichen Testfunktion. Die Einschränkung auf zweidimensionale Simulationen ist nicht zwingend, eine Ausweitung auf drei Dimensionen ist aber nicht Inhalt dieser Arbeit.

Stattdessen wird für dreidimensionale Simulationen die Streufeldberechnung parallelisiert, um einen Einsatz von Mehrprozessorcomputern zu ermöglichen und somit die Rechenzeit deutlich zu reduzieren. Diese Methode wird auch bei den simulationstechnischen Untersuchungen an Mikrostrukturen angewandt. Hier werden an dünnen Schichtstrukturen und kleinen Würfelementen mikromagnetische Rechnungen durchgeführt. Die möglichen Grundkonfigurationen, die auftreten, falls keine externe Erregung vorliegt, werden berechnet. Ausgehend von den hierbei gewonnenen Erkenntnissen, werden systematisch die Schaltvorgänge untersucht. Die Parameter für die Geometrie und die der Materialeigenschaften sind so gewählt, daß die häufigsten Schaltvorgänge auftreten und analysiert werden können. Am Beispiel dünner Schichtstrukturen wird auch die Anwendung der mikromagnetischen Simulationen auf magnetoresistive Sensoren in die Untersuchungen mit eingeschlossen. So können die charakteristischen magnetoresistiven Kennlinien aus den mikromagnetischen Rechnungen gewonnen werden. Die Ergebnisse zeigen die starke Abhängigkeit der Kennlinien von der Art der Erregung und dem Verhältnis von Länge zu Breite. Bei den

Untersuchungen von kleinen Würfelementen steht die Anwendung der Speichertechnik im Vordergrund. Hier ist die Bestimmung des Schaltfeldes von entscheidender Bedeutung. Es kann gezeigt werden, daß das Schaltfeld von der Symmetrie der Magnetisierungskonfigurationen stark abhängig ist, und eine Symmetriebrechung durch ein schräg anliegendes, externes Feld hervorgerufen werden kann. Diese Untersuchungen werden ebenfalls an unterschiedlichen Materialparametern vorgenommen, um verschiedene Schaltvorgänge analysieren zu können. Die Schaltgeschwindigkeit kann mit der in dieser Arbeit angewendeten statischen Beschreibung der mikromagnetischen Theorie nicht berechnet werden.

10 Literatur

- [AHA66a] A. Aharoni, „Magnetization curling,“ *Phys. Status Solidi*, vol. 16, pp. 1-42, 1966
- [AHA66b] A. Aharoni, „Energy of one-dimensional domain walls in ferromagnetic films,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 37, pp. 3271-3279, 1966
- [AHA91] A. Aharoni, „Magnetostatic Energy Calculations,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol.27, pp. 3539-3547, 1991
- [AHA96] A. Aharoni, „Introduction to the Theory of Ferromagnetism,“ Clarendon Press, Oxford, 1996
- [AHA98a] A. Aharoni, „Incoherent magnetization reversal in elongated particles,“ *EMMA98*, July 1998
- [AHA98b] A. Aharoni, „Critique on the numerical micromagnetics of nano-particles,“ *MNP98*, July 1998
- [ARR79] A.S. Arrott, B. Heinrich, et al., „Micromagnetics of curling configurations in magnetically soft cylinders,“ *J. Appl. Phys.*, vol.50, pp. 2387-2389, 1979
- [ARR91] A.S. Arrott, „Micromagnetics of ultrathin films and surfaces,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 69, pp. 5212-5214, 1991
- [ASS86] P. Asselin, A. A. Thiele, „On the Field Lagrangians in Micromagnetics,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 22, pp. 1876-1880, 1986
- [AUB76] G. Aubert, Y. Ayant, E. Belorizky, R. Casalengo, „Various methods for analyzing data on anisotropic scalar properties in cubic symmetry. Application to magnetic anisotropy of nickel,“ *Phys. Rev.*, vol. B14, pp. 5314-5326, 1976
- [BEA58] C.P. Bean, R.W. DeBlois, „Experimental measurement of fundamental magnetic properties. Magnetic Properties of Metals and Alloys,“ *Am. Soc. Metals*, Cleveland, pp. 18-55, 1958

- [BER93a] D.V. Berkov, et al., „Solving Micromagnetic Problems,“ *Phys. Status Solidi*, vol. 137, p. 207, 1993
- [BER93b] D.V. Berkov, K. Ramstöck, T. Leibl, A. Hubert, „Numerical Micromagnetics in Low-Anisotropy Materials,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 29, no. 6, pp. 2548-2550, 1993
- [BLO32] F. Bloch, „Zur Theorie des Austauschproblems und der Remanenzerscheinung der Ferromagnetika,“ *Z. Phys.*, vol. 74, pp. 295-335, 1932
- [BOZ78] R. M. Bozorth, „Ferromagnetism,“ IEEE Press, New York, 1978
- [BRI88] E.O. Brigham, „The Fast Fourier Transform and its Applications,“ Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall, 1988
- [BRO57] W.F. Brown, Jr., „Criterion for uniform micromagnetization,“ *Phys. Rev.*, vol. 105, pp. 1479-1482, 1957
- [BRO62] W.F. Brown, Jr., „Magnetostatic Principles in Ferromagnetism,“ North Holland, Amsterdam, 1962
- [BRO63a] W.F. Brown, Jr., „Micromagnetics,“ Wiley, New York, 1963
- [BRO63b] W.F. Brown, Jr., „Thermal fluctuations of a single domain particle,“ *Phys. Rev.*, vol. 130, pp. 1677-1686, 1963
- [BRO65] W.F. Brown, Jr., A.E. LaBonte, „Structure and energy of one-dimensional domain walls in ferromagnetic thin films,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 36, pp. 1380-1386, 1965
- [BRO79] W.F. Brown, Jr., „Thermal fluctuations of fine ferromagnetic particles,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 15, pp. 1196-1208, 1979
- [BRU95] P. Bruno, „Theory of interlayer magnetic coupling,“ *Phys. Rev.*, vol. B52, pp. 411-439, 1995

- [CAL97] L. Callegaro, E. Puppini, „Rotational Hysteresis Model for Stressed Ferromagnetic Films,“ IEEE Trans. Magn., vol. 33, no.2, 1997
- [CHE92] W. Chen, D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „Micromagnetic Studies of Interacting Permalloy Particles,“ IEEE Trans. Magn., vol. 28, no. 5, 1992
- [CHE93] W. Chen, D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „A New Finite Element Method in Micromagnetics,“ IEEE Trans. Magn., vol. 29, no. 3, 1993
- [DAR74] M.I. Darby, E.D. Isaac, „Magnetocrystalline anisotropy of ferro- and ferrimagnetics,“ IEEE Trans. Magn., vol. 10, pp. 259-301, 1974
- [DÖR66] W. Döring, „Mikromagnetismus,“ Handbuch der Physik, vol. 18/2, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, pp.341-437, 1966
- [DRU81] W.F. Druyvesteyn, J.A.C. van Ooyen, L. Postma, E.L.M. Raemaekers, J.J.M. Ruigrok, J. de Wilde, „Magnetoresistive Heads,“ IEEE Trans. Magn., vol.17, no.6, pp. 2884-2889, 1981
- [EHL88] J. Ehlert, F. K. Hübner, et al., „Micromagnetics of cylindrical particles,“ Phys. Status Solidi, vol. 106, pp. 239-248, 1988
- [FAB96] K. Fabian, A. Kirchner, W. Williams, F. Heider, T. Leibl, A. Hubert, „Three-dimensional micromagnetic calculations for magnetite using FFT,“ Geophys. J. Intern., vol. 124, pp. 89-104, 1996
- [FIL93] B.N. Filippov, L.G. Korzunin, „The Effect of Magnetic Surface Anisotropy on the Structure of Domain Walls in Magnetic Films,“ IEEE Trans. Magn., vol. 29, no. 6, 1993
- [FRE87] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „Numerical micromagnetics by the finite element method,“ IEEE Trans. Magn., vol. 23, pp. 3385-3387, 1987
- [FRE88a] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „Numerical micromagnetics by the finite element method II,“ J. Appl. Phys., vol. 63, pp. 3179-3181, 1988
- [FRE88b] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „Numerical micromagnetics of small particles,“

- IEEE Trans. Magn., vol. 24, pp. 2362-2367, 1988
- [FRE89] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „Numerical micromagnetics: Prolate spheroids,“ IEEE Trans. Magn., vol.25, pp. 3473-3475. 1989
- [FRE90a] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „Ab initio micromagnetic calculations for particles,“ J. Appl. Phys., vol. 67, pp. 5544-5548, 1990
- [FRE90b] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „Numerical micromagnetics: Rectangular parallelepipeds“ IEEE Trans. Magn., vol. 26, pp. 1518-1520, 1990
- [FRE90c] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, „Magnetization of a biaxial single-domain ferromagnetic particle,“ IEEE Trans. Magn., vol. 26, pp. 1071-1073, 1990
- [FRE90d] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, “Hybrid method for computing demagnetizing field,“ IEEE Trans. Magn., vol. 26, pp. 415-417, 1990
- [FRE91] D.R. Fredkin, T.R. Koehler, et al., „Magnetization reversal in Permalloy particles: Micromagnetic computations,“ J. Appl. Phys., vol. 69, pp. 5276-5278, 1991
- [FRI99] M. Frigo, S.G. Johnson, „Subroutine library (FFTW) for computing the Discrete Fourier Transform (DFT) in one or more dimensions,“ Massachusetts Institute of Technology, USA, 1999
- [GER78] R. Gersdorf, „Experimental evidence for the X_2 hole pocket in the fermi surface of Ni from magnetic crystalline anisotropy,“ Phys. Rev. Lett., vol. 40, pp. 344-346, 1978
- [HAY88] N. Hayashi, T. Inoue, et al., „Direct solution of Landau-Lifshitz-Gilbert equation for domain walls in thin Permalloy films,“ IEEE Trans. Magn., vol. 24, pp. 3111-3113, 1988
- [HAY96] N. Hayashi, K. Saito, et al., “Calculation of demagnetizing field distribution based on fast Fourier transform of convolution,“ Jpn. J. Appl. Phys., vol. 35, pp. 6065-6073, 1996

- [HAY97] N. Hayashi, K. Kosavisutte, et al., „Micromagnetic calculation of domain structure in thin magnetic film based on improved LaBonte method,“ IEEE Trans. Magn., vol. 33, pp. 4164-4166, 1997
- [HEI28] W. Heisenberg, „On the Theory of Ferromagnetism,“ Z. Physik, vol. 49, pp. 619-636, 1928
- [HER98] R. Hertel, H. Kronmüller, „Adaptive Finite Element Mesh Refinement Techniques in Three-Dimensional Micromagnetic Modelling,“ IEEE Trans. Magn., vol. 34, no. 6, 1998
- [HOF70] F. Hoffmann, „Dynamic pinning induced by nickel layers on Permalloy films,“ Phys. Status Solidi, vol. 41, pp. 807-813, 1970
- [HUB71] A. Hubert, „Interaction of Domain Walls in Thin Magnetic Films,“ Czech. J. Phys., vol. B21, 1971
- [HUB79] A. Hubert, „Charged walls in thin magnetic films,“ IEEE Trans. Magn., vol. 15, pp. 1251-1260, 1979
- [HUB81] A. Hubert, „Charged magnetic domain walls under the influence of external fields,“ IEEE Trans. Magn., vol. 17, pp. 3440-3443, 1981
- [HUB85] A. Hubert, „The calculation of periodic domains in uniaxial layers by a micromagnetic domain model,“ IEEE Trans. Magn., vol. 21, pp. 1604-1606, 1985
- [HUB91] A. Hubert, M. Rührig, „Micromagnetic analysis of thin-film elements,“ J. Appl. Phys., vol. 69, pp. 6072-6077, 1991
- [HUB98a] A. Hubert, R. Schäfer, „Magnetic Domains,“ Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1998
- [HUB98b] A. Hubert, W. Rave, „How Well Defined are Closure Domains,“ J. Magn. Magn. Mat, vol. 142, 1998
- [HUB99] A. Hubert, S. A. Zielke, W. Rave, „Die systematische Untersuchung

- mikromagnetischer Schaltvorgänge," Frühjahrstagung der Physikalischen Gesellschaft, Münster, 1999
- [JON97] M. Jones, J. J. Miles, „An accurate and efficient 3-D micromagnetic simulation of metal evaporated tape," J. Magn. Magn. Mat., vol. 171, pp. 190-208, 1997
- [KIT49] C. Kittel, „Physical Theorie of ferromagnetic domains," Rev. Mod. Phys., vol. 21, pp. 541-583, 1949
- [KIT56] C. Kittel, J.K. Galt, „Ferromagnetic domain theory," Solid State Phys., vol. 3, pp. 437-565, 1956
- [KOE92] T.R. Koehler, D.R. Fredkin, „Finite element methods for micromagnetics," IEEE Trans. Magn., vol. 28, pp. 1239-1244, 1992
- [KOE96] T.R. Koehler, M.L. Williams, „Micromagnetic simulation of 10 GB/in² spin valve heads," IEEE Trans. Magn., vol. 32, no. 5, pp. 3446-3448, 1996
- [KRO66] H. Kronmüller, „Magnetisierungskurve der Ferromagnetika I, Moderne Probleme der Metallphysik," Springer, Berlin, Heidelberg, New York, vol. 2, p.24-156, 1966
- [LAB95] M. Labrune, J. Miltat, „Wall structures in ferro/antiferromagnetic exchange coupled bilayers, A numerical micromagnetic approach," J. Magn. Mat., vol. 151, pp. 231-245, 1995
- [LAN35] L.D. Landau, E. Lifshitz, „On the Theory of magnetic permeability in ferromagnetic bodies," Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, englische Übersetzung, pp. 153-169, 1935
- [LYB93] A. Lyberatos, D.V. Berkov, et al., „A method for the numerical simulation of the thermal magnetization fluctuations in micromagnetics," J. Phys. Condensed Matter, vol. 5, pp. 8911-8920, 1993
- [LU92] P.-L. Lu, S.H. Charap, „Angular Variation of Coercivity in Thin-Film Media by Micromagnetic Model," IEEE Trans. Magn., vol. 28, no. 2, 1992

- [LYP96] A. Lyberatos, R.W. Chantrell, „Thermally activated magnetization reversal in the micromagnetic approach,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 29, no. 9, pp. 2332-2342, 1996
- [MAN88] M. Mansuripur, R. Giles, „Demagnetizing field computation for dynamic simulation of the magnetization reversal progress,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 24, pp. 2326-2328, 1988
- [MAT97] R. Mattheis, K. Ramstöck, J. McCord, „Formation and Annihilation of Edge Walls in Thin-Film Permalloy Strips,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 33, no. 5, pp. 3993-3995, 1997
- [MCC96] J. McCord, et al., „Domain Observation on Magnetoresistive Sensor Elements,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 32, no. 5, pp. 4806-4809, 1996
- [MCC97] J. McCord, „Magneto-optische Untersuchungen an Magnetoresistiven Schichtsystemen,“ Dissertation, Technische Fakultät der Universität Nürnberg-Erlangen, 1997
- [MCG75] T.R. McGuire, R.I. Potter, „Anisotropic magnetoresistance in ferromagnetic 3d alloys,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 11, pp. 1018-1038, 1975
- [NAK89] Y. Nakatani, Y. Uesaka, N. Hayashi, „Direct Solution of the Landau-Lifschitz-Gilbert Equation for Micromagnetics,“ *Japan. J. appl. Phys.*, vol. 28, pp. 2485-2507, 1989
- [NIS98] Benchmark Standard Problem #1, NIST Center for Theoretical and Computational Materials Science (CTCMS), 1998
- [PAR87] L. Pareti, G. Turilli, „Detection of singularities in the reversible transverse susceptibility of an uniaxial ferromagnet,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 61, pp. 5098-5101, 1987
- [PRE92] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, „Numerical Recipes in FORTRAN,“ San Diego, Academic Press, 1992
- [RAM94] K. Ramstöck, T. Leibl, A. Hubert, „Optimizing Stray Field Computations in Finite-Element Micromagnetics,“ *J. Magn. Magn. Mat.*, vol. 135, pp. 97-110,

1994

- [RAM96a] K. Ramstöck, W. Hartung, A. Hubert, „The Phase Diagram of Domain Walls in Narrow Magnetic Strips,“ *Phys. Status Solidi*, vol. 155, pp. 505-518, 1996
- [RAM96b] K. Ramstöck, A. Hubert, „Techniques for the Computation of Embedded Micromagnetic Structures,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 32, no. 5, pp. 4228-4230, 1996
- [RAM97] K. Ramstöck, „Mikromagnetische Rechnungen an isolierten und eingebetteten Strukturen,“ Dissertation, Technische Fakultät der Universität Erlangen-Nürnberg, 1997
- [RAV97] W. Rave, K. Ramstöck, „Micromagnetic Calculation of the Grain Size Dependence of Remanence And Coercivity in Nanocrystalline Permanent Magnets,“ *J. Magn. Magn. Mat.*, vol. 171, pp. 97-82, 1997
- [RAV98a] W. Rave, K. Fabian, A. Hubert, „Magnetic States of Small Cubic Particles with Uniaxial Anisotropy,“ *J. Magn. Magn. Mat.*, vol. 190, pp. 332-348, 1998
- [RAV98b] W. Rave, K. Ramstöck, et al., „Corners and nucleation in micromagnetics“ *J. Magn. Magn. Mat.*, vol. 183, pp. 328-332
- [RAV99] Unveröffentlichte Ergebnisse, entstanden aus einer Zusammenarbeit mit W. Rave und A. Hubert, 1999
- [SCH88] M.E. Schabes, H.N. Bertram, „Magnetization Processes in Ferromagnetic Cubes,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 64, no. 3, pp. 1347-1357, 1988
- [SCH91a] H.F. Schmidts, H. Kronmüller, „Size dependence of the nucleation field of rectangular ferromagnetic parallelepipeds,“ *J. Magn. Magn. Mat.*, vol. 94, pp. 220-234, 1991
- [SCH91b] M.E. Schabes, „Micromagnetic theory of non-uniform magnetization processes in magnetic recording particles,“ *J. Magn. Magn. Mat.*, vol. 95, pp. 249-288, 1991

- [SCH92] T. Schrefl, J. Fidler, „Numerical simulation of magnetization reversal in hard magnetic materials using a finite element method,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 111, pp. 105-114, 1992
- [SCH93] T. Schrefl, H.F. Schmidts, et al., „Nucleation fields and grain boundaries in hard magnetic materials,“ IEEE Trans. Magn., vol. 29, pp. 2878-2880, 1993
- [SCH94] T. Schrefl, J. Fidler, et al., „Nucleation fields of hard magnetic particles in 2D micromagnetic and 3D micromagnetic calculations,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 138, pp. 15-30, 1994
- [SCH96a] T. Schrefl, J. Fidler, et al., „Micromagnetic modelling of multilayer media,“ J. Phys. D Appl. Phys., vol. 29, pp. 2352-2361, 1996
- [SCH96b] T. Schrefl, J. Fidler, „Numerical micromagnetics in hard magnetic and multilayer systems,“ J. Appl. Phys., vol. 79, pp. 6458-6463, 1996
- [SCH96c] T. Schrefl, J. Fidler, „Numerical micromagnetics for granular magnetic materials,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 157/158, pp. 331-335, 1996
- [SCH97] T. Schrefl, J. Fidler, et al., „A higher order FEM-BEM method for the calculation of domain processes in magnetic nano-elements,“ IEEE Trans. Magn., vol. 33, pp. 4182-4184, 1997
- [SCH99] M. Schwabe, „Doppelstreifige magneto-resistive Sensoren mit hoher Formanisotropie,“ Dissertation, Institut für Mikrotechnologie, Universität Hannover, 1999
- [SHE94] J.R. Shewchuk, „An introduction to the Conjugate Gradient Method,“ School of Computer Science, Carnegie Mellon University, 1994
- [SHI92] H. Shinada, et al., „Dynamic Micromagnetic Field Measurement by Stroboscopic Electron Beam Tomography,“ IEEE Trans. Magn., vol. 28, no. 2, 1992
- [SLO90] J. C. Slonczewski, „Magnetic theory of very small devices,“ J. Appl. Phys., vol. 67, pp. 5341-5346, 1990

- [SLO91] J.C. Slonczewski, „Theory of domain dynamics in film heads,“ IEEE Trans. Magn., vol. 27, pp. 4784-4786, 1991
- [SLO95] J. Slonczewski, „Overview of interlayer exchange theory,“ J. Magn. Mat., vol. 150, pp. 13-24, 1995
- [STO48] E.C. Stoner, E.P. Wohlfarth, „A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys,“ Phil. Trans. Roy. Soc., vol. A240, pp. 599-644, 1948
- [TAK96] K.M. Tako, M.A. Wongsam, et al., „Micromagnetics of polycrystalline two-dimensional platelets,“ J. Appl. Phys., vol. 79, no. 8/2B, pp. 5767-5769, 1996
- [TAK96] K.M Tako, M.A. Wongsam, et al., „Numerical simulation of 2D thin films using a finite element method,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 155, pp. 40-42, 1996
- [TAK97] K.M. Tako, T. Schrefl, et al., „Finite element micromagnetic simulations with adaptive mesh refinement,“ J. Appl. Phys., vol. 81, pp. 4082-4084., 1997
- [THO97] P.J. Thompson, R. Street, „Viscosity, reptation and tilting effects in permanent magnets,“ J. Phys. D, Appl. Phys., vol. 30, pp. 1273-1284, 1997
- [TOR85] E.D. Torre, „Fine Particle Micromagnetics,“ IEEE Trans. Magn., vol. 21, no. 5, 1985
- [TOR86] E.D. Torre, „Magnetization Calculation of Fine Particles,“ IEEE Trans. Magn., vol. 22, no. 5, 1986
- [TOR90] E.D. Torre, „Modeling of Magnetizing Processes,“ Proceedings of the IEEE, vol. 78, no. 6, 1990
- [UES91] Y. Uesaka, Y. Nakatani, et al., „Micromagnetic calculation of applied field effect on switching mechanism of a hexagonal platelet particle,“ Jpn. J. Appl. Phys., vol. 30, pp. 2489-2502, 1991
- [UES93] Y. Uesaka, Y. Nakatani, et al., „Computer simulation of switching fields and magnetization states of interacting cubic particles: Cases with fields applied parallel to the easy axes,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 123, pp. 209-218, 1993

- [USO92a] N.A. Usov, S.E. Peschany, „Modeling of equilibrium magnetization structures in fine ferromagnetic particles with uniaxial anisotropy,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 110: L1-L6, 1992
- [USO92b] N.A. Usov, Y.B. Grebenschikov, et al., „Criterion for stability of a nonuniform micromagnetic state,“ Z. Phys., vol. B 87, pp. 183-189, 1992
- [USO93a] N.A. Usov, S.E. Peschany, „Magnetization curling in a fine cylindrical particle,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 118, L290-294, 1993
- [USO93b] N.A. Usov, „On the concept of a single-domain nonellipsoidal particle,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 125, L7-13, 1993
- [USO94] N.A. Usov, S.E. Peschany, „Flower state micromagnetic structure in fine cylindrical particles,“ J. Magn. Magn. Mat., vol. 130, pp. 275-287, 1994
- [VEC89] R.M. Del Veccio, „Micromagnetics Calculation for Two-Dimensional Thin-Film Geometries Using a Finite-Element Formulation,“ IEEE Trans Magn., vol. 25, pp. 4322-4329, 1989
- [VIA88] A. Viallix, F. Boileau, et. all., „A New Method for Finite Element Calculation of Micromagnetic Problems,“ IEEE Trans. Magn., vol. 24, pp. 2371-2373, 1988
- [VIE93] M. Vieth, H. van den Berg, „Magnetoresistive Permalloy Sensors with Increased Sensitivity,“ IEEE Trans. Magn., vol. 29, no. 6, pp. 2685-2687, 1993
- [YAN88] Y.D. Yan, E.D. Torre, „Discretization Errors in Numerical Micromagnetic Models,“ IEEE Trans. Magn., vol. 24, no. 6, pp. 2368-2370, 1988
- [YAN89] Y.D. Yan, E.D. Torre, „Modeling of Elongated Fine Ferromagnetic Particles,“ J. appl. Phys., vol. 66, pp. 320-327, 1989
- [YAN98] B. Yang, D. Fredkin, „Dynamical Micromagnetics by the Finite Element Method,“ IEEE Trans. Magn., vol. 34, no. 6, 1998

- [YUA91a] S.W. Yuan, H.N. Bertram, „Domain wall dynamic transitions in thin films,“ *Phys. Rev.*, vol. B 44, pp. 12395-12405, 1991
- [YUA91b] S.W. Yuan, H.N. Bertram, „Domain Wall Structures and Dynamics in Thin Films,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 27, pp. 5511-5513, 1991
- [YUA92a] S.W. Yuan, H.N. Bertram, „Magnetic thin film domain wall motion under dynamic fields,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 72, pp. 1033-1038, 1992
- [YUA92b] S.W. Yuan, H.N. Bertram, „Inhomogeneities and coercivity of soft Permalloy thin films,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 28, pp. 2916-2918, 1992
- [YUA92c] S.W. Yuan, et al., „Size Effects of Switching Fields of Thin Permalloy Particles,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 28, no. 5, 1992
- [YUA92d] S.W. Yuan, H.N. Bertram, „Fast adaptive algorithms for micromagnetics,“ *IEEE Trans. Magn.*, vol. 28, pp. 2031-2036, 1992
- [YUA93a] S.W. Yuan, H.N. Bertram, „Domain-wall dynamics in thick Permalloy films,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 73, pp. 5992-5994, 1993
- [YUA93b] S.W. Yuan, H.N. Bertram, „Micromagnetics of small unshielded MR elements,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 73, pp. 6235-6237, 1993
- [YUA94] S.W. Yuan, H.N. Bertram, „Micromagnetics of GMR spin-valve heads,“ *J. Appl. Phys.*, vol. 75, pp. 6385-6387, 1994
- [YUA96] C.W. Yuan, Z. Zheng, et al., „Vortex images in thin films of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ and $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_1\text{Cu}_2\text{O}_8 + x$ obtained by low-temperature magnetic force microscopy,“ *J. Vac. Sci. Technol.*, vol. B 14, pp. 1210-1213, 1996